

307. 226

V  
1953

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

FARAGÓ PÉTER, GÁSPÁR REZSŐ, NAGY ELEMÉR,  
SIMONYI KÁROLY ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI:  
JÁNOSSY LAJOS

I. KÖTET



MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST, 1953

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat változó terjedelmű füzetekben jelenik meg és az Akadémia III. Osztályának előadóülésein bemutatott dolgozatokat, továbbá magyar és egyes külföldi fizikusok dolgozatait, közleményeit tartalmazza. Évenként egy kötet jelenik meg, hat füzetben, füzetenként hat ív terjedelemben.

Kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus,  
Budapest, XII., Konkoly Thege-út.  
Központi Fizikai Kutató Intézet.

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt 50 különlenyomat illet meg megjelent munkájáért.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémia Kiadó, Budapest, V. Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 04-878-111-48), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, VI. Sztálin út 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 45-790-057-50-032) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. Amennyiben a cikk témáját folyóiratban először publikálják, a téma előzményeit, az általánosan elfogadott nézeteket a bevezetőben a szokásnál részletesebben fejtsek ki és a cikk megírásakor a didaktikai szempontoknak megfelelően érvényesítsék.
2. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt irjanak.
3. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség külön fogja kérni.
4. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettő sorközzel készítsék el.
5. Az ábrákat ceruzával sima fehér papíron rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a kiadó vállalja.
6. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget irjanak.
7. A szövegközi formulákban ferde törtvonalat, pl.  $1/2$ , törtek helyett lehetőleg negatív kitevőt, gyökjel helyett pedig törtkitevőt, az  $e^{-kT}$  típusú kifejezések helyett pedig  $\exp(-kT)$  jelölést alkalmazzanak.
8. A vektorokat **fett** betűvel jelölik. Ha a dolgozatban operátor is szerepel, ezt írják **fett** betűvel, a vektorokat pedig gót betűvel.



# BEKÖSZÖNTŐ

Írta

JÁNOSSY LAJOS

A Magyar Tudományos Akadémia elhatározta egy magyar nyelvű fizikai folyóirat kiadását. A folyóirat címe: Magyar Fizikai Folyóirat. Minthogy több fizikával foglalkozó folyóirat van hazánkban, nem felesleges néhány szóval megindokolni ennek az új folyóiratnak a kiadását.

A Magyar Tudományos Akadémia kiadásában jelenik meg az *Acta Physica*, amelyben magyar szerzők cikkei idegen nyelven jelennek meg. Az *Acta Physica* szerepe igen fontos, mert ha a magyar szerzők csak anyanyelvükön jelentetnék meg cikkeiket, akkor vagy elszigetelődnének a külföldi fizikusoktól, vagy kénytelenek lennének éppen a legfontosabb eredményeiket külföldi folyóiratokban publikálni. Minthogy egyik sem kívánatos, az Akadémia az *Acta Physica* révén nyújt segítséget a magyar fizikusoknak, hogy itthon is publikálhassanak idegen nyelven és mivel éppen az utolsó időkben az Akadémia különös súlyt helyez az Acták külföldi terjesztésére, ezzel a külfölddel való kapcsolatok kérdése sikeresen meg is oldható.

Az a kialakult szokás viszont, hogy a fizikusok majdnem kizárólag az *Acta Physicában* közlik munkáikat, könnyen egészségtelen állapothoz vezethet. Először is nem szabad elfelejtenünk, hogy — különösen a fiatal fizikusaink között — nem sokan rendelkeznek elegendő nyelvtudással ahhoz, hogy az Actában megjelenő cikkeket nehézség nélkül tanulmányozhassák. Így az *Acta* segítségével biztosítható ugyan a külfölddel való kapcsolat, azonban azzal a veszéllyel, hogy belföldi viszonylatban következik be bizonyos elszigetelődés. Ez a szempont teszi különösen fontossá a Magyar Fizikai Folyóirat kiadását.

Vannak azonban még más fontos szempontok is. A magyar fizikai szaknyelv eléggé fejletlen és ilyen szaknyelv is csak akkor fejlődhet ki, ha alkalom van magyar nyelvű dolgozatok közlésére. Sőt a nyelvi szempontoktól eltekintve, az új folyóirat az egész magyar fizikai élet színvonalának fejlődése szempontjából is fontos.

Az *Acta Physica* a magyar fizikát képviseli külföldön, ezért a benne közlésre kerülő cikkeket különleges szigorral kell megválogatni abból a szempontból, hogy eléggé fontos problémákkal foglalkoznak-e, hoznak-e lényegesen új eredményeket, stb. Azonban sem a laboratóriumban, sem az elméleti fizikus dolgozószobájában nem kész és véglegesen kidolgozott formában születnek meg



az eredmények. Különösen a laboratóriumi munka során szükséges igen sok mellékfeladat megoldása, nagyon hosszú kísérlet-sorozatok, úgyhogy minden kutatómunka — a fő és végleges eredmény elérése mellett — igen sok érdekes tapasztalatra és mellékeredményre vezet. Nagyon fontos, hogy legyen alkalom és lehetőség ezekről a mellékeredményekről, tapasztalatokról, stb., a nyilvánosság előtt beszámolni. A tapasztalatcsere részben ugyan kialakul személyes kapcsolatok által, vándorgyűlések és más előadások során, sokkal helyesebb azonban, ha — különösen fiatal kutatók számára megteremtjük azt a lehetőséget, hogy problémáikkal és eredményeikkel dolgozatok formájában is a nyilvánosság elé léphessenek és ezzel sokkal szélesebbkörű összeköttetéseket teremtsünk meg. Új fizikai folyóiratunk erre is módot kíván adni.

A Magyar Fizikai Folyóirat célja nemcsak eredmények lerögzítése, hanem más értékes közleményeket is kíván hozni. Bizonyos mértékben oktatási szándékról van szó. A szerkesztőségnek az a kívánsága, hogy a magyar nyelven megjelenő cikkek jellege bizonyos szempontból eltérjen az Acta Physicában megjelenő cikkekétől. A szerkesztőbizottság nagyon fontosnak tartja, hogy speciális tárgyú cikkek elé olyan bevezetés kerüljön, amely összefoglalja a problémák előzményeit és az e téren elért legfontosabb eredményeket, bővebben, mint ez általában szokásos.

Hazai szerzők eredeti cikkein kívül közölni szándékozunk magyar fordításban külföldi cikkeket is. Erre a célra két külön rovatot tervezünk. Először is minden számban vagy egy újabban megjelent érdekes külföldi cikknek a fordítását fogjuk hozni, vagy egy külföldi cikk összefoglalóját. A másik rovatban olyan dolgozatot fogunk magyar fordításban közölni, amelynek fizikai ismereteink fejlődésében alapvető fontossága volt. Így arra gondolunk, hogy pl. Max Planck-nak vagy Einsteinnek alapvető cikkeit és más ezekhez hasonlókat fogunk egymásután közölni és pedig tárgyilag összetartozó sorozatokban. Ezek a cikkek — szükség szerint — megfelelő kommentárral fognak megjelenni, és azt kívánjuk elérni, hogy különösen a fiatal fizikus generáció alkalmat kapjon a nagy fizikusok munkáinak eredeti formában való megismerésére.

Vázoltuk ezzel folyóiratunk programját. Ez a program nyilvánvalóan eltér az ugyancsak magyar nyelvű és már régebben megjelenő Fizikai Szemle programjától, minthogy a Fizikai Szemlének bizonyos mértékben ismeretterjesztő feladata van és elsősorban nem a kutatóknak szól és nem eredeti kutatási eredmények közlésére szolgál.

Tisztázzuk még folyóiratunk viszonyát az Akadémia III. Osztályának közleményeihez is. Az a szándékunk, hogy a Magyar Fizikai Folyóiratban közöljük az olyan cikkek túlnyomó részét is, amelyek az eddigi szokás szerint az Osztályközleményekben jelenhetnének meg. Így ezek a dolgozatok sem elszigetelve jelennek meg, hanem sok olyan cikkel együtt, amelyek nem kerültek az Akadémia előtt bemutatásra. Reméljük, hogy ilyenformán a Magyar Fizikai Folyóirat a hazai fizikai kutatásokról hű képet fog adni.



*Meg kell még emlitenünk a szerkesztőbizottságnak azt a határozatát, hogy elvben hajlandó olyan cikkeket is közölni, amelyek már egy Intézet közleményeiben (pl. TKI közlemények, KFKI közlemények, stb.) megjelentek. Ez a határozat azért jött létre, mert ha ilyen dolgozatok közlését kizárnánk, akkor vagy megnehezítenénk az egyes intézeti közlemények szerkesztését vagy pedig, eleve lemondanánk arról — ami a legfőbb célunk — hogy hű képet adjunk a magyar fizikai kutatásokról.*

*Reméljük, hogy a magyar fizikusok az új folyóiratot szívesen fogadják és számítunk az intézetek és a fizikusok legszorosabb együttműködésére. Bízunk benne, hogy az intézetek és kutatók tudományos eredményeikről szóló beszámolóikkal gazdagítani fogják folyóiratunkat.*







# AZ ENERGIA MECHANIKAI MOZGÁSEGYENLETEI\*

NOVOBÁTZKY KÁROLY, akadémikus

Eötvös Lóránd Tudományegyetem Fizikai Intézete

Az Einstein-féle tétel az energia és a tömeg azonosságáról, melynek révén az energia bizonyos testiséget nyer, közelfekvővé teszi a kérdést, nem alapozható-e meg az energia dinamikája. Kinematikailag az energia mozgása tudvalevőleg könnyen írható le. Gondoljunk valamilyen fizikai térre, pl. az elektromágneses vagy mezontérre. A teret általában egy  $L$  Lagrange-függvény határozza meg. Felépítése részint a specifikus térmennyiségekkel történik (elektromágneses tér esetén a négyes potenciállal), részint a  $g_{ik}$  mértéktenzorral. Ha már most a

$$\int L \sqrt{g} dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 \quad (1)$$

integrált a  $g^{ik}$ -k szerint variáljuk, megkapjuk a  $T_{ik}$  ( $i, k = 1, 2, 3, 4$ ) szimmetrikus mértéktenzort. Tizenhat komponensét a következő négyzetes skémába szokás elrendezni:

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} & T_{14} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} & T_{24} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} & T_{34} \\ T_{41} & T_{42} & T_{43} & T_{44} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

A tisztán 1, 2, 3 indexekkel ellátott komponensek a jól ismert Maxwell-féle feszültségek. A negyedik sorban, ill. negyedik oszlopban álló komponensek, melyek a 4 indexet is tartalmazzák, a legközvetlenebb kapcsolatban állanak a térenergia áramának sűrűségével. Utóbbinak, a Poynting-féle vektornak, szokásos jele  $\mathfrak{E}_1, \mathfrak{E}_2, \mathfrak{E}_3$ . A kapcsolatok a következők:

$$T_{41} = T_{14} = \frac{i}{c} \mathfrak{E}_1, \quad T_{42} = T_{24} = \frac{i}{c} \mathfrak{E}_2, \quad T_{43} = T_{34} = \frac{i}{c} \mathfrak{E}_3. \quad (3)$$

Ha végül a tér egy-egy helyén fellépő energiasűrűséget  $u$ -val jelöljük, akkor

$$T_{44} = -u. \quad (4)$$

Zárt erőter esetén, mikor külső erők nem lépnek fel, az energiaimpulzustenzor négy divergenciakifejezése zérus:

\* Érkezett 1953. szept. 28.



$$\begin{aligned}
\frac{\partial T_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{13}}{\partial x_3} + \frac{\partial T_{14}}{\partial x_4} &= 0, \\
\frac{\partial T_{21}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{22}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{23}}{\partial x_3} + \frac{\partial T_{24}}{\partial x_4} &= 0, \\
\frac{\partial T_{31}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{32}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{33}}{\partial x_3} + \frac{\partial T_{34}}{\partial x_4} &= 0, \\
\frac{\partial T_{41}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{42}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{43}}{\partial x_3} + \frac{\partial T_{44}}{\partial x_4} &= 0.
\end{aligned} \tag{5}$$

Itt  $x_4 = ict$ , ahol  $t$  az időt jelenti. Amint könnyen ki lehetne mutatni, a három első egyenlet az impulzus, a negyedik az energia megmaradását hozza kifejezésre.

Legyenek a mozgó térenergia sebességi komponensei  $v_1, v_2, v_3$ , akkor zárt erőter esetén

$$\Xi_1 = uv_1, \quad \Xi_2 = uv_2, \quad \Xi_3 = uv_3. \tag{6}$$

Az első divergencia-egyenlet most nyilván így írható

$$\frac{\partial \Xi_1}{\partial t} = -c^2 \left( \frac{\partial T_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{13}}{\partial x_3} \right). \tag{7}$$

Hasonló kifejezés érvényes  $\frac{\partial \Xi_2}{\partial t}$ -re és  $\frac{\partial \Xi_3}{\partial t}$ -re is. A negyedik egyenlet pedig ezt az alakot veszi fel

$$\frac{\partial \Xi_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \Xi_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \Xi_3}{\partial x_3} + \frac{\partial u}{\partial t} = 0, \tag{8}$$

vagy

$$\frac{\partial uv_1}{\partial x_1} + \frac{\partial uv_2}{\partial x_2} + \frac{\partial uv_3}{\partial x_3} + \frac{\partial u}{\partial t} = 0. \tag{9}$$

Vezessünk be még formailag egy  $v_4 = ic$  negyedik sebességi komponenst is és képezzük a  $uv_i v_k$  tenzort. Négyes divergenciájára a következő kifejezést kapjuk:

$$\frac{\partial uv_i v_k}{\partial x_k} = v_i \frac{\partial uv_k}{\partial x_k} + uv_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k}. \tag{10}$$

A jobboldali első tag (9) szerint 0. A második tag

$$uv_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} = u \left\{ \frac{\partial v_i}{\partial x_1} v_1 + \frac{\partial v_i}{\partial x_2} v_2 + \frac{\partial v_i}{\partial x_3} v_3 + \frac{\partial v_i}{\partial x_4} v_4 \right\}, \tag{11}$$

ahol az utolsó tag  $\frac{\partial v_i}{\partial t}$ . Tehát az egész jobboldali kifejezés  $u \frac{dv_i}{dt}$ . Következik, hogy

$$u \frac{dv_i}{dt} = \frac{\partial uv_i v_k}{\partial x_k} = \frac{\partial uv_i}{\partial t} + \frac{\partial uv_i v_k}{\partial x_k} \quad (k=1, 2, 3). \tag{12}$$

Mivel a jobboldalon álló  $u v_i = \Xi_i$  és  $\frac{\partial \Xi_i}{\partial t}$  a (7) egyenletből helyettesíthető, végeredményként írható

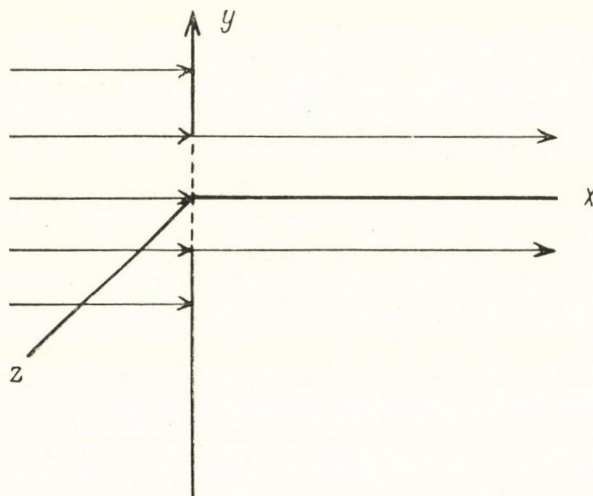
$$u \frac{d v_i}{d t} = \frac{\partial}{\partial x_k} (u v_i v_k - c^2 T_{ik}) \quad (k = 1, 2, 3). \quad (13)$$

Ez az energia keresett mozgásegyenlete, amelyhez hozzájárul a (9) kontinuitási egyenlet.

A hasonlatosság az anyagi kontinuumok hidrosztatikai egyenleteivel félreismerhetetlen. A sűrűség és gyorsulás szorzata anyag esetében is egy tenzornak, a feszültségtenzornak divergenciájával azonos, egészen úgy mint itt, ahol a feszültségtenzor helyét elfoglalja az

$$S_{ik} = u v_i v_k - c^2 T_{ik} = -c^2 \left( T_{ik} + \frac{i}{c} v_i T_{k4} \right) \quad (14)$$

kifejezés. Téves volna azt hinni, hogy a (13) jobboldalán fellépő erőnek bármi köze volna a ponderomotoros erőhöz. Világosan látszik ez a különbség az elektromágneses tér esetében. Ott a ponderomotoros erő, a jól ismert Lorentz-erő, az elektromos töltésre, ill. áramra hat, itt pedig az energiára.



Fényelhajlás

Ha tehát ismerni akarjuk az áramló térenergiára ható erőket, először meg kell oldanunk a téregyenleteket, hogy az energiaimpulzustenzor konkrét alakját előállíthassuk. Ennek ismeretében ugyancsak konkrét formában nyerhető az energia  $S_{ik}$  feszültségtenzora, melynek divergenciája szolgáltatja az energiára ható erőket. A számítás technikájára vonatkozólag a probléma mechanizálása tehát nem jelent előnyt. Arra azonban igenis alkalmas, hogy betekintést nyújtson a mechanikától távolálló jelenségek lefolyásának szükség-szerűségébe. Ilyen pl. a fényelhajlás az ernyő egy kis nyílásán át. Legyen a



nyílás egy kis derékszögű parallelogramma és vetítsünk rá merőleges fénynyalábot. Jól tudjuk, hogy a nyíláson áthaladva a fény már nem terjed tovább párhuzamosan, hanem elhajlást szenved. Hogy miért, arra semmi szemléletes megokolást nem tudunk adni, legföljebb azt mondhatjuk, hogy így kívánják a Maxwell-féle egyenletek. Most azonban abban a helyzetben vagyunk, hogy az elhajlás szükségszerűségét mechanikailag demonstrálhassuk. Legyen a fény beesésének iránya az  $X$  tengely és tegyük fel, hogy a fény nem hajlik el, hanem az áthaladás után is párhuzamos marad. Ezt a feltevést könnyű ad absurdum vinni. Szerinte az energia csak az  $X$  tengely mentén haladna:  $v_1 \neq 0, v_2 = v_3 = 0$ . Kérdezzük, nem hat-e erre az energiára az  $Y$  és  $Z$  irányban bizonyos eltérítő erő. Ebből a célból képezzendők az  $u \frac{dv_2}{dt}$ , ill.  $u \frac{dv_3}{dt}$  kifejezése.

$$u \frac{dv_2}{dt} = -c^2 \frac{\partial}{\partial x_k} \left( T_{2k} + \frac{i}{c} v_2 T_{k4} \right). \quad (15)$$

A jobboldali második tag a  $v_2 = 0$  feltevés miatt kiesik. Marad tehát

$$u \frac{dv_2}{dt} = -c^2 \left( \frac{\partial}{\partial x_1} T_{21} + \frac{\partial}{\partial x_2} T_{22} + \frac{\partial}{\partial x_3} T_{23} \right). \quad (16)$$

Egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy a fény az  $Y$  irányban lineárisan polárizott, úgyhogy  $\mathfrak{E}_y$  elektromos és  $\mathfrak{H}_z$  mágneses térerősségen kívül minden más komponens zérus. Ekkor a  $T_{21}$  és  $T_{23}$  Maxwell-féle feszültségek kiesnek és marad

$$u \frac{dv_2}{dt} = -c^2 \frac{\partial}{\partial x_2} T_{22}. \quad (17)$$

Itt  $T_{22}$  a nyaláb felső határlapjának belső oldalán véges érték, külső oldalán, a sugárzásmentes térben zérus, tehát  $\frac{\partial T_{22}}{\partial x_2}$  végtelen nagy értékű, és ebből következik, hogy végtelen nagy erő igyekszik a fényenergiát az  $Y$  tengely irányában elmozdítani. Evvel megkaptuk a fényelhajlás mechanikai okát. Egészen hasonlóan áll a helyzet, ha elemi részek, pl. elektronok nyalábja esik igen kicsiny elhajlító nyílásra. A Schrödinger-egyenlet is Lagrange-függvényből származtatható, melyből tehát az energiaimpulzustenzor  $T_{ik}$  komponensei ugyancsak meghatározhatók. Ha feltennők, hogy az elektronok a nyíláson áthaladva párhuzamosan mozognának tovább, pontosan ugyanahhoz az ellentmondáshoz jutnánk, mint a fény esetében.

A mondottakból látható, hogy az energiának és vele együtt a sugárzó energia tömbjének, a fotonnak, vannak klasszikus mechanikai mozgásegyenletei, de a ható erőt a kellő határfeltételekkel megoldott téregyenletek határozzák meg. A téregyenletek játsszák a primer szerepet, a mechanikai egyenletek a fizikai elemzés elmélyítését szolgálják.

# MAGNYOMATÉKOK MÉRÉSE MÁGNESES REZONANCIA-ABSZORBCIÓVAL\*

FARAGÓ PÉTER, GÉCS MÁRIA és MERTZ JÁNOS  
Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest  
Elektromágneses Hullámok Osztálya

Magnyomatékok mérésére többféle módszer áll rendelkezésre. Ezek a módszerek azonban kevésbé konkurrálnak egymással, inkább kiegészítik egymást. Azokban az esetekben, amikor egyáltalán alkalmazható, akkor pontosság szempontjából igen előnyös, a legközvetlenebb, technikailag a legegyszerűbb mérési módszer a mágneses rezonancia-abszorbcio módszere.

Elsőnek 1936-ban *Gorter*<sup>1</sup> próbálta meg mágneses térbe helyezett gáz spin-átmenetek okozta abszorbciját rádiótechnikai eszközökkel kimutatni, azonban próbálkozása eredménytelen maradt. 1940—41-ben *Singer István*<sup>2</sup> foglalkozott a kérdés elméleti vizsgálatával és doktori értekezésében a kísérlet sikerének lehetőségét kimutatta, bár erősen idealizált, t. i. a környezettől és egymástól független atommagokból álló sokaságra. Az első sikeres kísérletet 1946-ban *Purcell, Torrey és Pound*<sup>3</sup> végezte, azóta pedig a módszer többféle kivitelben sokfelé használatos.<sup>4</sup> Intézetünkben 1950 elején kezdtünk a problémakörrel foglalkozni. Az irodalomban leírt különféle módszerek reprodukálása során az egyik módszer alkalmazása terén igen kedvező eredményre jutottunk és erről az 1951. évi pécsi fizikus vándorgyűlésen beszámoltunk, de különféle okok miatt csak ezúttal kerül sor nyomtatásban való közlésére.

A szóbanforgó módszer végső fokon azon alapul, hogy — mint ismeretes — egy  $I$  spinű,  $\mu$  mágneses nyomatékú atommag  $\mathbf{H}_0$  intenzitású állandó mágneses térben  $(2I+1)$ -féle képpen állhat be a mágneses térhez képest. Az egyes beállásoknak különböző

$$U(m) = -\mu_H H_0 = -\frac{\mu}{I} H_0 m$$

energia felel meg és ezen energiaállapotok között a  $\Delta m = \pm 1$  kiválasztási szabály érvényes, úgyhogy az egyes állapotok közti átmenetek

$$h\nu_0 = \frac{\mu}{I} H_0 \quad (1)$$

energiájú fotonok elnyelésével, illetve kibocsátásával történnek.

*Proton esetében* tehát, mivel  $\mu = 2,8$  mag-mageton  $= 2,8 \cdot 5 \cdot 10^{-24}$  erg/gauss és  $I = 1/2$ ,  $H_0 = 5.000$  gauss térintenzitás esetén  $\nu_0 = 21,3$  Mc és általában minden atommagnál kényelmesen kezelhető rádiófrekvencia tartományába esik.

\* Kivonatossan elhangzott az 1951. évi pécsi fizikus vándorgyűlésen.



Az (1) alatti feltétellel meghatározott  $\nu_0$  frekvencia éppen a  $H_0$  mágneses erőterben precesszáló  $\mu$  momentumú mágneses dipólus Larmor-frekvenciája.  $H_0$  mágneses erőterbe helyezett  $\mu$  momentumú dipólusra u. i.

$$\mathbf{L} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{H}_0$$

forgató nyomaték hat, ahol  $\mathbf{p}$  az impulzusmomentum. Tekintetbe véve, hogy atommagok esetén  $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{p}$ , ahol  $\gamma$  az ú. n. giromágneses érték:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\gamma \mathbf{H}_0 \times \mathbf{p} \quad (2)$$

Ebből az egyenletből látható, hogy a precesszió szögsebessége valóban:

$$\omega_0 = -\gamma \mathbf{H}_0. \quad (1a)$$

Hogy a spinátmenetek csak meghatározott frekvenciával váltakozó mágneses térrel gerjeszthetők, az a precesszáló mágneses dipólusok klasszikus tárgyalása alapján is várható. Ez a klasszikus kép ezen felül a gerjesztő erőter polarizációs viszonyaira kirótt feltétel tekintetében is ad támpontot.

Ha a  $\mathbf{H}_0$  állandó erőter irányára merőleges  $2H_1 \ll H_0$  amplitúdójú  $\omega$  körfrekvenciával szinuszosan váltakozó mágneses erőteret alkalmazunk, akkor ezt az erőteret két egymással ellenkező irányban forgó tér szuperpozíciójaként foghatjuk fel.

Jobbra forog:  $H_x = H_1 \cos \omega t$

balra forog:  $H_x = H_1 \cos \omega t$

$$H_y = H_1 \sin \omega t$$

$$H_y = -H_1 \sin \omega t$$

A két forgó erőter közül az egyik forgási iránya megegyezik a dipólus precessziójának irányával. Ha az erőter a precesszióval rezonanciában van, vagyis  $\omega = \omega_0$ , akkor a dipólussal együtt forgó erőter egy olyan  $\mathbf{L}'$  forgatónyomatékot hoz létre, mely a dipólusnak a  $H_0$  erőterrel bezárt szögét meg akarja változtatni; míg az ellenkező irányban forgó tér hatása elhanyagolható.

A kísérlet lényege tehát abból áll, hogy a vizsgálandó atomokat egy  $H_0$  állandó intenzitású és egy erre merőleges, váltakozó mágneses térbe helyezzük és megkeressük azt az  $\omega_0$  frekvenciát, amelynél az abszorpció bekövetkezik.

$H_0$  és  $\omega_0$  mért értékéből  $\frac{h}{I}$  (1) szerint kiszámítható.

Méréseinket azonban nem egyes atomokon, hanem makroszkópikus anyagmintán kívánjuk elvégezni és az abszorpciót makroszkópikus módszerekkel akarjuk kimutatni. Annyi bizonyos, hogy termikus egyensúly esetén a  $\mathbf{H}_0$  erőterbe helyezett anyagminta atommagjai a lehetséges spinállapotokat a Boltzmann-féle energia-eloszlási törvény szerint töltik be. Mivel az egyes spinállapotoknak megfelelő energiák igen kevéssel különböznek egymástól, az alacsonyabb és magasabb energiájú állapotokban levő magok száma sem sokban különbözik. Ezért az abszorbeált energia mindenképpen igen kevés és hogy egyáltalán kimutatható, az egy makroszkópikus anyagmintában levő atomok számának igen nagy volta miatt remélhető. Az is nyilvánvaló, hogy



a gerjesztő tér a termikus egyensúlyt igyekszik felborítani és a különböző spin-állapotokat egyenletesen betölteni. „Nettó abszorpció” tehát csak addig lesz észlelhető, amíg ez be nem következik, vagyis amíg a termikus egyensúly lényegesen meg nem változik.

Hogy makroszkópiusan, tartósan észlelhető abszorpció mégis van, azt a magok közötti és környezetükkel való kölcsönhatása okozza, amely rádiófrekvenciás gerjesztés esetén is kialakít egy megfelelő egyensúlyi állapotot.

Szigorú kvantumelméleti megfontolások helyett egy „fél-makroszkópos” gondolatmenettel<sup>5</sup> meghatározzuk az egész anyagminta  $\mathbf{M}$  mágnesezését, melyet az időben változó  $\mathbf{H}$  erőter hoz létre. Ebből az egységnyi térfogatban, egységnyi idő alatt abszorbeált energia — akárcsak a hiszterézis veszteség esetén — a

$$W_0 = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M} \quad (3)$$

integrálból lesz kiszámítható.

A (2) alatti egyenletet ilyen alakban írhatjuk:

$$\frac{d\mu}{dt} = \gamma \mu \times \mathbf{H}$$

vagy a térfogategységben levő mágneses momentumát megfelelő súllyal összegezve a makroszkópikus mágnesezés vektorára a következő összefüggést kapjuk:

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}. \quad (4)$$

Ez az egyenlet még csak az egymástól és a környezetüktől független atommagokra érvényes.

A valóságban a környezettel való energia-kicserélődés ellene dolgozik a nagyfrekvenciás tér kiegyenlítő hatásának, amennyiben igyekszik visszaállítani az energiaállapotok eredeti betöltöttségét. Így egy új egyensúlyi állapot fog beállni, amikor a spin átmenetek által elnyelt energia egyenlő az ellenkező irányú spin átmenetek révén a környezetnek leadott termikus energiával. 1/2 spin esetén tehát a kétféle lehetséges spin-beállításban levő magok számaránya megváltozik. Statisztikus megfontolások szerint a változást a következő differenciál egyenlet írja le:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{T_1} (n_0 - n) \quad (5)$$

ahol  $n$  a két különböző energianívón levő részecskék számának különbsége,  $n_0$  e mennyiség termikus egyensúlyi állapot esetén.  $T_1$  a termikus egyensúly beálltára jellemző időállandó az ú. n. termikus relaxációs idő, amely szükséges ahhoz, hogy 1/e-ed rész kivételével a többletet adó magok elérjék az alsó energia állapotot. Mivel a spin energiát a  $\mathbf{M}$  polarizációs vektornak az



állandó tér irányába eső komponense szabja meg, az alsó energia nivó többlet magjainak száma  $M_z$ -vel lesz arányos, tehát ennek időbeli változását hasonló egyenlettel írhatjuk le:

$$\frac{dM_z}{dt} = \frac{1}{T_1} (M_0 - M_z), \quad (6)$$

ahol  $M_0 = \chi_0 H_0$ , a konstans térnek megfelelő polarizáció termikus egyensúly esetén és  $\chi_0 = \frac{N}{3kT} \cdot \mu^2 \frac{I+1}{I}$  a Curie-féle szuszceptibilitás.

A mágneses polarizáció vektorának időbeli változását befolyásolja a magok mágneses nyomatékai miatt fellépő kölcsönhatás is. Valójában egy mag helyén a mágneses tér intenzitását a külső erőterén kívül a környező mágneses dipólusok eredő tere szabja meg és a környező magnyomatékok különféle beállási lehetőségének megfelelően a vizsgált mag a valóságban  $H_0$ -nál valamivel kisebb vagy nagyobb eredő térben van. Ennek az ingadozó  $H_{lok}$  lokális erőternek megfelelően a Larmor-frekvencia  $\Delta\omega_0 = \gamma H_{lok}$  értékű szórást mutat. Az abszorpciós vonal ilyen széles abszorpciós sávra szélesedik. Ezt úgy is értelmezhetjük, hogy ha egy időpillanatban két mag nyomatéka fázisban precesszál, akkor  $1/\Delta\omega_0$  idő múlva a fázis-összefüggés elromlik. E frekvencia bizonytalanság reciproka az az időbizonytalanság, amely a spinállapot élettartamát jellemzi.

Egy spinállapot élettartamát nemcsak a mágneses térintenzitás helyi ingadozásából adódó frekvencia bizonytalansággal hozhatjuk összefüggésbe. Ha két mag egymáshoz képest antiparallel spinbeállással precesszál és fázisuk megfelelő, akkor a másik helyén mindegyik olyan teret létesít, amely átmenetet gerjeszthet. Ha ez bekövetkezik, akkor a két mag szerepe, mondhatjuk, hogy a két mag felcserélődik. Miután a fázisuk  $1/\Delta\omega$  idő alatt lényegesen eltolódik, ilyen nagyságrendű idő szükséges ahhoz, hogy két tetszőlegesen kiragadott mag precessziója fázisba jusson, ezáltal a kettő felcserélődése létrejöjjön; ez lesz ezért egy spinállapotnak az élettartalma, amely éppen a fent vázolt folyamattal szűnik meg. Ez az élettartam a bizonytalansági reláció szerint egy  $\Delta u \sim \hbar \Delta\omega_0$  energia bizonytalansággal jár, ami ismét azt mutatja, hogy az abszorpciós sáv kiszélesedik. (A kétféle mechanizmus eredménye ugyanaz és külön-külön létezik. Ezt az bizonyítja, hogy különböző magokból álló keverékben a spin kicserélődési folyamat a lényegesen eltérő precessziós frekvenciák miatt nem jön létre, csak a zavaró lokális tér növeli meg a sáv-szélességet.)

Az egyes precesszáló spinek közti fázisviszony időbeli változása nem befolyásolja az energiát, csak az eredő momentum  $x$  és  $y$  komponensét változtatja meg. Egy  $T_2$  időállandóval való exponenciális csökkenést feltételezve a következő egyenletek állnak fenn:

$$\frac{dM_x}{dt} = -\frac{M_x}{T_2}; \quad \frac{dM_y}{dt} = -\frac{M_y}{T_2} \quad (7)$$



(6) és (7)-et figyelembe véve, (4) komponensekre kiírva így alakul:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dM_x}{dt} &= \gamma [M_y H_0 + M_z H_1 \sin \omega t] - \frac{M_x}{T_2} \\ \frac{dM_y}{dt} &= \gamma [M_z H_1 \cos \omega t - M_x H_0] - \frac{M_y}{T_2} \\ \frac{dM_z}{dt} &= \gamma [M_x H_1 \sin \omega t - M_y H_1 \cos \omega t] + \frac{M_0 - H_z}{T_1} \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Meg lehet mutatni, hogy ennek az egyenletrendszernek a megoldása olyan  $\mathbf{M}$  vektor, melynek abszolút értéke időben állandó, sőt olyan stacionár megoldása is van, melynél  $M_z$  is állandó. Erre az esetre szorítkozva,  $M_x$  és  $M_z$  értékéül a következőket kapjuk:

$$M_x = \frac{1}{2} \chi_0 \omega_0 T_2 \frac{(2H_1 \cos \omega t) T_2 (\omega_0 - \omega) + 2H_0 \sin \omega t}{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2} \quad (8a)$$

$$M_z = \chi_0 H_0 \frac{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2}{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2} \quad (8b)$$

( $M_y$  is különbözik zérustól, ennek fellépése okozza az ú. n. atommagindukció jelenségét, amelyen egy ugyancsak rádiófrekvenciás, de a szóbanforgótól eltérő típusú magnyomaték mérési módszer alapul.)

Nézzük meg miként lehet  $M_x$  fenti kifejezését értelmezni. — Minden esetre látható, hogy a  $2H_1$  amplitudójú  $x$  irányú váltakozó erőter hozza létre. Tegyük fel, hogy egy anyagban a  $\mathbf{H}$  váltakozó térintezítés egy vele egyező irányú és azonos frekvenciával, de eltérő fázissal változó mágnesezést hoz létre. Az időbeli változást a komplex írásmóddal kifejezve tehát a

$$H_x = \text{Re} (2H_1 e^{j\omega t})$$

erőter által létrehozott mágnesezés:

$$\begin{aligned} M_x &= \text{Re} (2H_1 |\chi| e^{j(\omega t - \varphi)}) = \text{Re} [2H_1 (\chi' - j\chi'')(\cos \omega t + j \sin \omega t)] = \\ &= 2H_1 \chi' \cos \omega t + \chi'' \sin \omega t, \end{aligned} \quad (9)$$

ahol  $|\chi| e^{-j\varphi} = \chi' - j\chi''$  az anyagnak a komplex szuszceptibilitása, frekvenciától függő sajátja.

(9) és (8a) összehasonlítása mármint azt mutatja, hogy a  $\mathbf{H}_0$  állandó és erre merőleges  $H_x$  nagyfrekvenciás mágneses térbe helyezett anyagminta az atommagok mágneses nyomatéka miatt komplex szuszceptibilitást mutat, melynek komponensei:

$$\chi' = \frac{1}{2} \chi_0 \omega_0 T_2 \frac{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2}{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2} \quad (10)$$

$$\chi'' = \frac{1}{2} \chi_0 \omega_0 T_2 \frac{1}{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2} \quad (11)$$

Látható, hogy a két komponens közül  $\chi'$   $\omega$  függvényében diszperziós görbe,



$\chi''$  pedig rezonancia görbe alakú, a rezonanciafrekvencia a Larmor-frekvencia. A szuszceptibilitás két komponense közül a makroszkópikus energia abszorpciójára  $\chi''$  a mérvadó, mert (9) felhasználásával (3)-ból:

$$W_0 = 2H_1^2 \omega \chi'', \quad (12)$$

tehát  $\omega$  függvényében ugyancsak rezonanciaszerűen változik. Ez az összefüggés a mérési módszer alapja.

(11) alatti kifejezésből egyébként látható, hogy az abszorbeált energia értéke mindkét relaxációs időtől függ, s tartós abszorpció előfeltétele — mint kvalitatív megfontolásaink is mutatták — az, hogy a spineknek legyen a környezetükkel és egymással véges relaxációs időre vezető kölcsönhatása.

Ha a kölcsönhatás olyan gyenge, hogy  $H_1^2 \ll 1/\gamma^2 T_1 T_2$ , akkor

$$W_0 \sim \frac{\chi_0 \omega_0 \omega T_2}{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2} H_1^2,$$

az abszorpció csak a spin-spin kölcsönhatásból származó relaxációs időtől függ. Az abszorbeált energia ott csökken a felére, ahol  $T_2(\omega_0 - \omega) \sim 1$  tehát  $1/T_2$  az abszorpció sávszélességét adja.

Ha a gerjesztés erős, akkor rezonancia esetén:

$$W_0 \rightarrow \frac{\chi_0 \omega_0^2}{\gamma^2 T_1}$$

a véges abszorpciót a spin-rács kölcsönhatás még mindig biztosítja.

### Gyakorlati rész

A mérési módszer — mint említettük — a rezonancia frekvencián bekövetkező energia-abszorpció kimutatásán alapul. Rezonancia esetén az anyagminta egy rádiófrekvenciás oszcillátor tekercsének erőteréből energiát von el, miáltal a tekercs jósági tényezőjét lerontja. Ennek következménye az oszcillációs amplitudó csökkenése, azaz amplitudó moduláció.

Egy rezgőkör jósági tényezőjén — definíció szerint — a rezgőkörbe bevitt energia és egy periódus alatt abszorbeálódott energia hányadosának  $2\pi$ -szeresét értjük. Tehát a spinátmenetek miatti energiaabszorpció jellemzésére bevezethetjük a

$$Q_0 = \omega \frac{W_1}{W_0} = \frac{1}{2\pi \chi''} \quad (13)$$

„abszorpciós jósági tényezőt“-t;  $W_1 = \frac{(2H_1)^2}{8\pi}$  a mágneses tér maximális energiasűrűsége.

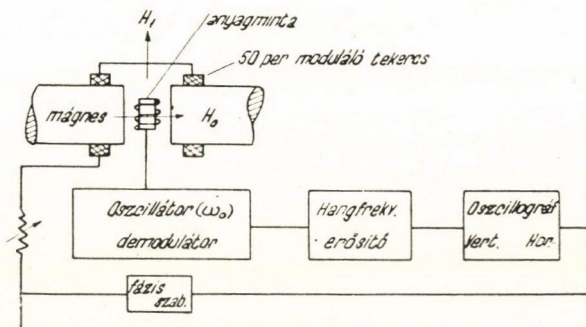
Ha  $Q_1$  a tekercs eredeti (üres) jósági tényezője,  $Q'$  pedig az abszorpció alatt az eredő, leromlott jósági tényező, akkor a relatív  $Q$ -változás:

$$\frac{\Delta Q}{Q_1} = \frac{Q_1 - Q'}{Q_1} = \frac{Q_1}{Q_0 + Q_1} \approx \frac{Q_1}{Q_0} = Q_1 4\pi \chi'', \quad \text{mert } Q_0 \gg Q_1$$



Normális rádiófrekvencián  $Q \approx 10^2$  nagyságrendű,  $Q_0 = \frac{1}{4\pi\chi''} \sim 10^5$  nagyságrendű, ezzel a várható százalékos  $Q$ -változás  $\frac{\Delta Q}{Q} \sim 10^{-3}$  nagyságrendű, azaz egy ezrelék körül van. A várható amplitudó moduláció ugyanakkora nagyságrendű, tehát ezrelékes modulált jelet kell kimutatni. Ez, figyelembe véve a hasonló nagyságrendű zajmodulációt, éppen a detektálhatóság határán van.

A mágneses rezonancia abszorpció mérése általunk használt kísérleti berendezés elvi vázlata az 1. ábrán látható.



1. ábra. Magnyomaték mérő berendezés elvi vázlata

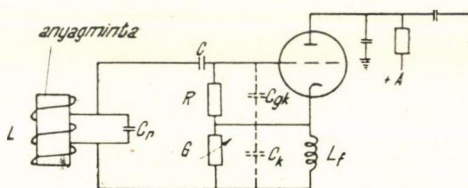
Egy kb.  $H_0 = 2000$  gauss körüli térerősségű, egy ezrelék térbeli homogenitású, elektromágnes pólusai közé helyezzük a vizsgálandó anyagmintát, jelen esetben vizet, a benne levő protonok magnyomatékát kívánjuk vizsgálni. Az erre merőleges irányú  $\omega_0 = \gamma H_0$  értéknek megfelelő frekvenciájú, kis amplitudójú teret egy oszcillátor rezgőköri tekercse adja. A rezonancia-görbe felvétele végett nem az oszcillátor frekvenciáját változtatjuk, hanem az állandó mágneses teret moduláljuk kis amplitudóval a hálózati 50 periódus ütemében. Ennek következtében ugyanilyen periódusban változik az anyagminta abszorpciója és vele együtt az oszcillátor adta rezgés amplitudója is: az oszcillátor az abszorpció változásnak megfelelő frekvenciával modulált nagyfrekvenciás rezgést ad. Audion egyenirányítás és kb. ezerszeres erősítés után a jelet oscillográfra visszük, amelynek vízszintes eltérítését — a jel fázisának megfelelő eltolással — szintén a hálózati 50 periódus adja.

A vázolt eljárás az irodalomban szerepel<sup>6</sup> és aszerint az abszorpció következtében az oszcillátor rezgése leszakad. Hogy ez bekövetkezik-e, az az oszcillátor munkapontjának beállításától függ. Mi az oszcillátort olyan beállításban használtuk, hogy a rezonancia helyen csak amplitudó csökkenés álljon be, vagyis az amplitudó a  $H_0$  térintenzitás függvényében úgy változzék, hogy belőle nemcsak  $H_0$  rezonancia-értéke legyen meghatározható, hanem a  $\chi''(H_0)$  függvény alakjü képe legyen kapható. Ezzel a módszer olyan mérésekre is

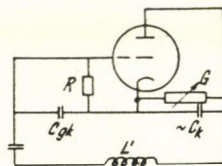


alkalmazható, ahol a rezonancia-maximum helyének meghatározásán túl a rezonancia görbe alakjának pontos ismerete is szükséges.

A használt oszcillátor kapcsolása a 2. ábrán látható. Működési elve a következő: a vizsgálandó anyagot tartalmazó rácsköri rezgőkör rezonancia frekvenciája sokkal magasabb, mint a katódköri fojtó tekercs, (szórt kapacitásával lehangolva). Az oszcillációs frekvencia a két kör rezonancia frekvenciája közé esik, tehát a rácsköri rezgőkör induktív, a katódköri pedig kapacitív impedanciaként viselkedik. A  $G$  ellenállással a csatolás mértékét, azaz az amplitudó nagyságát tudjuk csökkenteni, részint mert az oszcilláció határán a berendezés érzékenyebb a  $Q$  változására, részint pedig a nagy oszcillációs tereknél beálló telítés elkerülésére. Figyelembe véve a katód-rács kapacitást, az oszcillátor működése visszavezethető a Colpitts-féle kapcsolásra (1. 3. ábra).



2. ábra. Magnyomaték mérő oszcillátor kapcsolása



3. ábra. Az oszcillátor helyettesítő ábrája

A rácskörben elhelyezett rácskomplexum az abszorbcio révén amplitudó modulált oszcillációs frekvenciát audion egyenirányítással demodulálja.

Az oszcillációs frekvencia  $\omega^2 L(c + C_r) = 1$  összefüggésből adódik, ahol  $c$  a  $(c, c_{gk}, c_k)$  kapacitások soros eredője. Mivel esetünkben  $c \ll C_r$ , a rezgési frekvencia közel a rácsköri rezgőkör rezonancia frekvenciájával egyenlő.

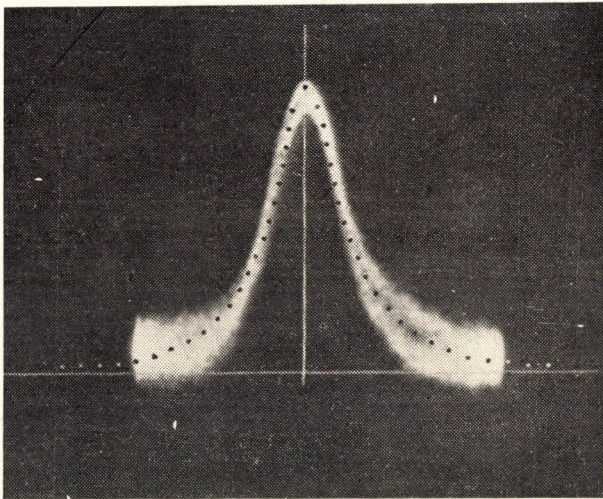
A fenti speciális kapcsolás előnye a szokásos oszcillátor kapcsolásokkal szemben egyrészt az, hogy egy darab megcsapolás nélküli, földelhető önindukcióval és szimpla forgó kondenzátorral oldható meg az oszcillátor hangolt köre. Másrészt a katódkörben előálló negatív visszacsatolás következtében az oszcillátor működése stabilabb, de a  $Q$  megváltozására érzékenyebb. Ezen felül bizonyos feltételek kielégítése mellett a berendezés kvantitatív mérések elvégzésére is alkalmas, mert az oszcillációs amplitudó megváltozása (amplitudó moduláció) arányos az abszorbcioval. Ezt szemlélteti a 4. ábrán látható fényképfelvétel. A képen pontozással feltüntetjük a számítás szerinti abszorbcio ábrázoló Gauss-görbét is. Állításunkat egyébként a következő megfontolás igazolja.

Mint kimutattuk, az abszorbcio jellemző  $\chi''$  mennyiség összefügg a jósági tényező relatív változásával:  $\frac{\Delta Q}{Q} = 4\pi Q \chi''$ , tehát keresnünk kell az amplitudó-moduláció függését a jósági tényező változásától. Ezt két lépésben végezzük el. Először az oszcilláció általános feltétele alapján megnézzük, hogy



adott jósági tényező változáshoz mekkora meredekség-változás tartozik, azután megmutatjuk, hogy másodfokú csőkarakterisztika esetén ez a meredekség változás mekkora amplitudó-változást hoz létre.

Az oszcilláció általános feltétele  $K\beta = 1$ , ahol a  $\beta$  a visszacsatolási tényező,  $K$  pedig a tényleges erősítés. Az oszcilláció alatt ez a feltétel mindig kielégül. Mivel  $\beta = \text{konst.}$ , kell, hogy a  $K$  is állandó legyen. Viszont  $K = Sr'_p$ , ahol  $r'_p = r_p \parallel R_b$ , a rezonancia ellenállás ( $r_p$ ) és a cső belső ellenállásának ( $R_b$ ) parallel eredője. Ez az érték a jósági tényező változása következtében megváltozik, mert a rezonancia ellenállás a jósági tényező függvénye:  $r_p = \omega L Q$ .



4. ábra. Oszcillográfon észlelt és számított abszorpciós görbe

A  $K = \text{konstans}$  feltétel tehát azzal fog teljesülni, hogy a közepes meredekség olyan irányban változik, hogy a rezonancia ellenállás változását kikompenzálja:

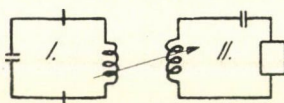
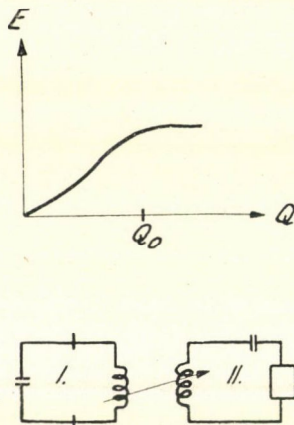
$$Sr'_p\beta = 1 \text{ tehát } \frac{\Delta S}{S} = -\frac{\Delta r'_p}{r'_p} = -\frac{1}{\omega L Q + R_b} \cdot \frac{\Delta Q}{Q}$$

Mármost az oszcillátorok általános elméletéből következik, hogy az oszcillációs amplitudó és a közepes meredekség között egy meghatározott véges tartományban folytonos összefüggés van. A közepes meredekség és a jósági tényező előbb látott összefüggése folytán ez az állítás az oszcillációs amplitudó és a jósági tényező kapcsolatára is igaz. Mivel az abszorpció következtében fellépő  $Q$ -változás igen kicsi, kísérletileg meghatározva az oszcillációs amplitudónak a jósági tényezőtől való függését, az arányossági faktor kiértékelhető. Legyen a rezgőköri tekercs eredeti jósági tényezője  $Q_1$ , akkor ezen pont környezetében az amplitudó változása valóban arányos az abszorpció mértékével, mert:

$$\Delta E = \left( \frac{\partial E}{\partial Q} \right)_{Q=Q_1} \Delta Q = 4\pi Q_1^2 \left( \frac{\partial E}{\partial Q} \right)_{Q=Q_1} \cdot \chi''$$



Az arányossági tényezőt szükség esetén kísérletileg meghatározhatjuk pl. az 5. ábra szerint a következőképpen. Az oszcillátor frekvenciájára hangolt II.



5. ábra. Az  $E=f(Q)$  meghatározásához

kör az I. körbe tiszta ohmos komponenst indukál be, melynek nagysága a kölcsönös indukció függvénye. Tehát a kölcsönös indukció változtatásával az I. kör jósági tényezőjét folyamatosan változtatva, az oszcillációs amplitudó mérésével  $E=f(Q)$  függvénygörbe felvehető, meredeksége  $(\partial E/\partial Q)$  pedig grafikusán meghatározható.

#### IRODALOM

- <sup>1</sup> Gorter : Physica, 3, 995, 1936.
- <sup>2</sup> Singer István : Spin-átmenetek homogén magnetosztatikus és reá merőleges rádió-frekvenciás elektromos, illetve mágneses térbe helyezett gázban. — Doktori értekezés. Budapest, 1941.
- <sup>3</sup> Purcell, Torrey—Pound: Phys. Rev. 69, 37, 1946.
- <sup>4</sup> Összefoglaló közlemény irodalmi adatokkal: Pake: Am. J. Phys. 18, 438 és 473, 1950.
- <sup>5</sup> Bloch : Phys. Rev. 70, 460, 1946.
- <sup>6</sup> Hopkins : Rev. Sci. Instr. 20, 401, 1949.

# MEGJEGYZÉSEK A POLARIZÁCIÓSENERGIA NUMERIKUS KISZÁMÍTÁSÁHOZ\*

HORVÁTH JÁNOS

Elméleti Fizikai Intézet, Szeged

Eltekintve *M. Born* és *W. Heisenberg* [1] egy régebbi vizsgálatától, a *HCl*-molekula kvantumelméleti tárgyalásával először *I. G. Kirkwood*, [2] majd *Gombás Pál* és *Neugebauer Tibor* [3] foglalkoztak.

1. A *Gombás—Neugebauer*-féle módszer alapfelgondolásait röviden az alábbiakban foglalhatom össze: A halogénhidrid molekulák ion-modelljének megfelelően, meggondolásaink során induljunk ki egy negatív klór ionból és protonból álló rendszerből. Közelítve a protont az ionhoz, elektrosztatikus kölcsönhatás eredményeképpen a klór elektronfelhője a protont vonzani, a klór mag pedig a protont taszítani fogja. Nagy távolságra a magtól az elektronfelhő teljesen leárnyékolja a mag pozitív töltését, sőt a feleslegben lévő elektron miatt az ion egy negatív töltéssel rendelkezve, vonzza a protont. Miközben azonban a proton a klór maghoz közeledik, mind jobban hehatol az ion elektronfelhőjébe, tehát az elektronfelhőnek mind kisebb és kisebb része fogja a magot árnyékolni. Előbb-utóbb tehát a mag taszító hatása lesz a nagyobb, szemben az elektronfelhő vonzó hatásával. E két erő egyensúlya adja első közelítésben a sósav molekula alapállapotát. Ha  $Z$ -vel jelöljük a klór rendszámát és  $R$ -rel a klór mag és a proton közti távolságot, úgy atomi egységben a rendszer energiáját elemi meggondolások után a következő alakba írhatjuk:

$$E_i = \frac{Z}{R} - \left\{ \frac{1}{R} \int_0^R U(r) dr + \int_R^\infty \frac{U(r)}{r} dr \right\},$$

ahol

$$U(r) = 4\pi r^2 u(r)$$

a radiális elektronsűrűség, mely a *Hartree*-féle [4], ill. a *Hartree—Fock*-féle [5] táblázatokból közvetlenül kiszámítható.

A molekula kötését kvalitatíve már ez az egyszerű modell is értelmezni tudja. Pontosabb számítás esetén azonban figyelembe kell venni a proton polarizálható hatása következtében fellépő vonzóerőt is, melyet *Gombás* és *Neugebauer* a kvantummechanikai perturbációszámítás második közelítése

\* Bemutatta Gombás Pál r. tag az 1952 március 3-án tartott felolvasó ülésen



alapján :

$$E_p = - \sum \frac{(i|V|k)(k|V|i)}{E_i - E_k}, \quad (i \neq k) \quad (1)$$

ahol

$$(i|V|k) = \int \psi_i^* V \psi_k d\tau \quad (2)$$

és

$$V = \frac{1}{\sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \vartheta}} - \frac{1}{R} \quad (3)$$

a perturbációs potenciál, a következőképpen vettek figyelembe: Az (1) alatti energiatag számlálóját egy közismert mátrixelméleti átalakítás segítségével átalakítva és a nevezőbe egy megfelelően definiált  $\bar{E} = h\bar{\nu}$  átlagenergiát bevezetve, írhatjuk, hogy

$$E_p = - \frac{1}{h\bar{\nu}} \{ (i|V^2|i) - (i|V|i)^2 \}, \quad (4)$$

ahol

$$(i|V|i) = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{1}{\sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \vartheta}} - \frac{1}{R} \right\} \frac{U(r)}{4\pi} \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi \quad (5)$$

és

$$(i|V^2|i) = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{1}{\sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \vartheta}} - \frac{1}{R} \right\}^2 \frac{U(r)}{4\pi} \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi. \quad (6)$$

A (4) alatti egyenletben a nevezőbe bevezetett  $\bar{\nu}$  átlagfrekvenciát úgy választjuk meg, hogy segítségével az ion kísérletileg ismeretes polarizálhatóságát *L. Pauling* formulájának a felhasználásával helyesen kapjuk. Az említett formula

$$\alpha = 2 \sum \frac{(i|D|k)(k|D|i)}{E_i - E_k}, \quad (i \neq k)$$

melyet ugyanúgy átalakíthatunk, mint az (1) alatti energiatagot:

$$\alpha = 2 \frac{(i|D^2|i)}{h\bar{\nu}},$$

ahol

$$(i|D|k) = \int \psi_i^* \left\{ \sum e Z_i \right\} \psi_k d\tau \quad \text{és} \quad (i|D^2|i) = \int \psi_i^* \left\{ \sum e Z_i \right\}^2 \psi_i d\tau$$

és  $\bar{\nu}$  a fenti átlagfrekvencia. Ebben a megoldásban tehát a  $\bar{\nu}$  egy félempirikus paraméter szerepét játssza.

A továbbiakban, az (1) alatti polarizációsenergia kiszámítása céljából *Gombás* és *Neugebauer* úgy jártak el, hogy az (5) és (6) alatti kifejezésekben a proton és elektron közti távolságot gömbfelületi függvények szerint sorbafejtették:

$$\frac{1}{\sqrt{R^2 + r^2 - 2rR \cos \vartheta}} = \begin{cases} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r^k}{R^{k+1}} P_k(\cos \vartheta) & r < R \\ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{R^k}{r^{k+1}} P_k(\cos \vartheta) & r > R, \end{cases} \quad (7)$$

ahol  $P_k(\cos \vartheta)$  a  $k$ -ik *Legendre*-féle polinom. Majd ezt a sorbafejtést behelyettesítve, a *Legendre*-féle polinomokra érvényes integrálformulák figyelembevételével, az (5) és (6) alatti integrálokra a következő formulát vezették le:

$$\begin{aligned} \langle i | V | i \rangle &= \int_R^{\infty} \frac{U(r)}{r} dr - \frac{1}{R} \int_R^{\infty} U(r) dr \\ \langle i | V^2 | i \rangle &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \frac{1}{R^{2k+2}} \int_0^R r^{2k} U(r) dr + \\ &+ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} R^{2k} \int_R^{\infty} \frac{U(r)}{r^{2k+2}} dr - \frac{2}{R} \int_R^{\infty} \frac{U(r)}{r} dr + \frac{1}{R^2} \int_R^{\infty} U(r) dr. \end{aligned}$$

A számítás további során az  $R$  proton-magtávolságot variációs paraméternek fogták fel és meghatározták azt az  $R$  értéket, ahol a molekula

$$E(R) = E_i(R) + E_p(R)$$

energiája minimális.

A számítások tényleges keresztülvitele során a (8) alatti sorbafejtésben a sornak csak néhány első tagját vették figyelembe. Ezen egymásután következő tagok rendre a molekula dipól-, kvadrupól-, stb. multipól-nyomatékával voltak kapcsolatba hozhatók. Tekintettel arra, hogy a molekula kötésében a magasabb multipól-komponensek nyilvánvaló módon elhanyagolhatóan kicsiny szerepet játszanak, ez a közelítés nem lehet rossz. Hogy a közelítés matematikailag is kielégítő legyen, a sor elhagyott tagjait approximative úgy vették figyelembe, hogy feltételezhették, hogy a sor tagjai úgy csökkennek, mint egy geometriai sor tagjai, mely geometriai sornak a kvóciensét a tekintetbe vett tagok viszonyának geometriai közepe adja. Így az elhagyott tagok összegét a geometriai sor összeg-formulája segítségével meg lehetett becsülni. A gyakorlatban ez mindössze néhány százalékos korrekciót jelentett.

2. *Gombás és Neugebauer* annak idején a Cl-ion sűrűség-függvényét a *Hartree*-táblázat felhasználásával számították ki. Néhány évvel később elkészült a megfelelő *Hartree—Fock*-táblázat is. Ennek a felhasználásával újraszámoltam a sósav kötési energiáját és a jobb sűrűség-eloszlás következtében valamivel a kísérleti értékhez közelebb eső eredményt kaptam. [6].

Tovább lehetett korrigálni a modellt azért, hogy a polarizációs-energia kiszámításánál figyelembevettem, hogy a klór-ion egyes lezárt héjai különböző mértékben polarizálódnak. [7]



A valóságban homogén térben, az ionoknak tulajdonképpen csak a legkülső elektronhéjuk polarizálódik. Különösen áll ez a negatív ionokra, ahol a külső héjon lévő elektronok sokkal lazábban kötöttek, mint a belső héjon lévő elektronok. E mellett tekintetbe kell még vennünk azt is, hogy a külső zárt héjak gömbszimmetrikus elektron-eloszlása leárnyékolja a belső héjakat, minek következtében a külső erőhatás, az amúgy is erősebben kötött belső héjra, praktice elhanyagolható hatást gyakorol.

Nem ez a helyzet azonban a sósavmolekula esetében, mert ott a proton, mely a polarizációt létrehozza, behatol a klór elektronfelhőjébe, következésképpen a polarizáló hatása, a külső polarizáló hatás elől leárnyékolta belső héjakra viszonylag elég nagy, annak ellenére, hogy ezen lezárt héjak polarizálhatósága praktice elhanyagolható a külső héj polarizálhatóságához viszonyítva.

Ennek a körülménynek a figyelembevétele a számítások során mindössze annyit jelent, hogy az egyes héjak esetében a polarizációs-energiát és a megfelelő átlagfrekvenciát külön-külön kell kiszámítani és az egyes héjak polarizációs energiának az összege adja a teljes polarizációs-energiát. Ez a kis korrekció már a sósav esetében is javítja az eredményt, várható azonban, hogy magasabb rendszámú halogénhidridek esetében lényegesen jobb közelítést ad. Az egyes héjak polarizálhatóságát, minthogy az természetesen kísérletileg nem ismeretes, a *Born—Heisenberg*-formula [1] segítségével lehet meghatározni.

3. Annak ellenére, hogy a *Gombás—Neugebauer*-féle módszer minden részletében fizikailag jól interpretálható, felmerül egy tisztán matematikai természetű probléma. Az (5) és (6) alatti mátrixelemekben az integrandus  $r=R$  és  $\vartheta=0$  esetében végtelenné válik, ami a (7) alatti sorbafejtésben úgy jelentkezik, hogy a *Legendre*-polinomok szerinti sorbafejtés  $r=R$  esetben divergens. Így, bár fizikai alapon nem kételkedhetünk a (4) energiatag végességében, matematikailag mégis felmerül az exisztencia-probléma, valamint az a követelmény, hogy ezt az energiatagot exaktul számítsuk ki. [8]

A (4) és (5) alatti mátrix-elemeket  $\varphi$  szerint integrálva a következő alakba írhatjuk:

$$(i|V|i) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \int_0^{\infty} \frac{U(r)}{\sqrt{R^2 + r^2 - 2rRx}} dr dx - \frac{1}{R} \int_0^{\infty} U(r) dr,$$

ill.

$$(i|V^2|i) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \int_0^{\infty} \frac{U(r)}{R^2 + r^2 - 2rRx} dr dx - \frac{1}{R} \int_{-1}^{+1} \int_0^{\infty} \frac{U(r)}{\sqrt{R^2 + r^2 - 2rRx}} dr dx + \\ + \frac{1}{R^2} \int_0^{\infty} U(r) dr.$$

Ezen mátrix-elemek exisztenciájának a bebizonyításához csak azt kell meg-

mutatnunk, hogy a

$$J_1 = \int_{0-1}^{\infty+1} \frac{f(r)}{\sqrt{R^2 + r^2 - 2rRx}} dr dx$$

és

$$J_2 = \int_{0-1}^{\infty+1} \frac{f(r)}{R^2 + r^2 - 2rRx} dr dx$$

integrálok léteznek, ahol  $f(r)$  az egész tekintetbe jövő tartományon folytonos és pozitív függvény, valamint  $|f(r)| \leq Ce^{-\lambda r}$ .

a) A  $J_1$  integranduszának  $r=R$ ,  $x=+1$  helyen szinguláris helye van, azt kell tehát megmutatnunk, hogy a

$$\lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ \tau \rightarrow 0}} G(\varepsilon, \tau) = G^*$$

határérték, ahol

$$G(\varepsilon, \tau) = \int_{-1}^{+1} \frac{f(R+\varepsilon)}{\sqrt{(R+\varepsilon)^2 + R^2 - 2R(R+\varepsilon)(x+\tau)}} dx$$

létezik. Minthogy feltételünk értelmében  $|f(r)| \leq Ce^{-\lambda r}$ , közvetlen integrálással kapjuk, hogy

$$\left| G(\varepsilon, \tau) \right| \leq \frac{C \cdot e^{-\lambda(R+\varepsilon)}}{R(R+\varepsilon)} \left| \sqrt{(R+\varepsilon)^2 + R^2 - 2R(R+\varepsilon)(1+\tau)} - \sqrt{(R+\varepsilon)^2 + R^2 - 2R(R+\varepsilon)(1-\tau)} \right|.$$

Tehát

$$\lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ \tau \rightarrow 0}} |G(\varepsilon, \tau)| \leq \frac{2Ce^{-\lambda R}}{R},$$

amivel  $J_1$  exisztenciáját bebizonyítottuk.

b) A  $J_2$  integrál esetében integráljunk  $x$  szerint, akkor kapjuk, hogy

$$\int_{-1}^{+1} \frac{f(r)}{R^2 + r^2 - 2rRx} dr = \frac{f(r)}{2rR} \log \left( \frac{R+r}{R-r} \right)^2$$

és akkor azt kell bebizonyítanunk, hogy a

$$J_2 = \int_0^{\infty} \frac{f(r)}{2rR} \log(R+r)^2 dr + \\ + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_0^{R-\varepsilon} \frac{f(r)}{rR} \log(R-\varepsilon) dr + \int_{R+\varepsilon}^{\infty} \frac{f(r)}{rR} \log(r-R) dr \right\}$$



kifejezés létezik. Mindenekelőtt meg kell jegyeznünk, hogy az  $\frac{f(r)}{r}$  függvény az egész értelmezési tartományon per definicionem folytonos; pontosabban  $r=0$  esetben nincs szingularitása és  $r \rightarrow \infty$ -re legalább  $e^{-\lambda r}$  mértékben csökken. Így az integrál alsó és felső határán semilyen probléma sem merül fel.

Hogy az integrál exisztenciáját  $r=R$  helyen is bebizonyíthassuk emlékeztetünk arra, hogy az  $[R, R']$  zárt intervallumban — ahol  $R < R' < \infty$  — minden  $\delta > 0$ -hoz mindig megadható egy

$$p(r) = a_0 + a_1 r + \dots + a_n r^n$$

polinom úgy, hogy

$$p(r) - \delta \leq \frac{f(r)}{r} \leq p(r) + \delta$$

egyenlőtlenség bármely  $r \in [R, R']$  esetében teljesüljön. Ekkor azonban írhatjuk, hogy

$$\left| \int_{R+\varepsilon}^{\infty} \frac{f(r)}{r} \log(r-R) dr \right| \leq \left| \int_{R+\varepsilon}^{R'} p(r) \log(r-R) dr \right| + \left| \int_{R'}^{\infty} \frac{f(r)}{r} \log(r-R) dr \right|.$$

Feltételeinknek megfelelően a második integrál véges, tehát csak az első kell megbecsülnünk. Ez azonban nem jelent további nehézséget. Helyettesítjük ugyanis be a  $p(r)$  polinomot, akkor tagonkénti integrálással a következő rekurziós formulához jutunk.

$$\begin{aligned} \int r^i \log(r-R) dr &= \frac{r^i}{i+1} (r-R) [\log(r-R) - 1] - \frac{r^i}{i+1} \left( \frac{i}{i+1} r + R \right) + \\ &+ \frac{i}{i+1} R \int r^{i-1} \log(r-R) dr. \end{aligned}$$

Ebben a rekurziós formulában fellépő egyes tagok mind végesek, mert az

$$(r-R) [\log(r-R) - 1]$$

faktort tartalmazó tag a

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \log \varepsilon = 0 \quad (8)$$

miatt eltűnik. Ezzel azonban egyúttal azt is bebizonyítottuk, hogy  $J_2 < \infty$ .

4. Miután ilymódon az (5) és (6) alatti mátrix-elemek exisztenciáját és ezzel a (4) alatti polarizációs energia exisztenciáját igazoltuk, felmerül a probléma, hogy a  $\mathcal{J}$  szerinti integrációval nem lehetne-e egy exakte levezetett formulát adni az energiatag kiszámítására és ez a formula milyen kapcsolatban van a Gombás—Neugebauer-féle módszerrel.

A viszonyok könnyebb áttekintése céljából tekintsük a következő integrált:

$$J = \int_{-1}^{\infty+1} \frac{2rRe^{-r}}{R^2 + r^2 - 2rRx} dr dx, \quad (R=2, 2)$$

melynek a kiszámítása egyedül problémátikus a valóságban, és határozzuk meg az értéket mindkét módszer segítségével.

A gömbfüggvények szerinti sorbafejtéssel  $J$ -re a következő kifejezést vezethetjük le:

$$J = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{4}{2i+1} \cdot \frac{1}{R^{2i+1}} \int_0^R r^{2i+1} e^{-r} dr + \sum_{i=0}^{\infty} \frac{4}{2i+1} \cdot R^{2i+1} \int_R^{\infty} \frac{e^{-r}}{r^{2i+1}} dr.$$

A számítás során a sorbafejtésben csak az első öt tagot vettem figyelembe. Az átlagos kvóciens 0,35580. Ezek alapján  $J = 1,88406$ .

Ha a másik módszer szerint  $x$  szerint integrálunk, akkor kapjuk, hogy

$$J = \int_0^{\infty} e^{-r} \log \left( \frac{R+r}{R-r} \right)^2 dr,$$

mellyet még  $r$  szerint integrálnunk kell. Az integrálnak  $r=R$  helyen szinguláris helye van. Az előbbieket alapján azonban ennek ellenére tudjuk, hogy az integrál létezik. Egyszerű számítással integrálunkat a következő alakba írhatjuk:

$$J = 2 \int_0^{\infty} e^{-r} \log(R+r) dr - 2 \int_0^{R-w} e^{-r} \log(R-r) dr - 2 \int_{R+w}^{\infty} e^{-r} \log(r-R) dr - \\ - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} 2 \left\{ \int_{R-w}^{R-\varepsilon} e^{-r} \log(R-r) dr + \int_{R+\varepsilon}^{R+w} e^{-r} \log(r-R) dr \right\}. \quad (9)$$

Hogy a számításokat explicite elvégezhessük, az  $[R-w, R+w]$  intervallumon közelítsük meg az  $e^{-r}$  függvényt egy másodrendű parabolával:

$$e^{-r} = ar^2 + br + c.$$

Ez a megközelítés, tekintettel arra, hogy  $w$ , mely nem más, mint a *Hartree—Fock*-féle táblázatban lévő abszcissa-különbség, nagyon kicsi, teljesen kielégítő. Hiszen az approximáció hibája legfeljebb

$$\eta = \Phi \cdot 2w(\log w - 1),$$

ahol

$$\Phi = \max |e^{-r} - (ar^2 + br + c)|$$

az  $[R-w, R+w]$  intervallumon.

Ezeknek és a (8) alatti formulának a felhasználásával a (9) alatti kifejezésben lévő zárójeles kifejezés a következő alakba írható:

$$w \left\{ \left[ \frac{a}{3} (w^2 - 3R(w-R)) + 2Rb + 2c \right] (\log w - 1) - \frac{aw}{2} \left( R - \frac{4}{9}w \right) \right\}.$$

Számításaim szerint most  $J = 1,76419$ , mely 6,79%-kal kisebb, mint a *Gombás—Neugebauer*-módszerrel számított érték.

Az eltérés tehát a két módszer között nem nagy. A valóságban a (4) alatti energiatag számításánál a viszonyok még kedvezőbbek, mert a fenti hiba egy része kompenzálódik.



5. A most megadott módszert alkalmaztam végül a sósav kötési energiájának a kiszámításánál. [9]. Az eredmény tovább javult. Az egyes számítások eredményeit áttekinthetőség céljából az alábbi táblázatban foglalom össze: A táblázat összeállításánál *Kirkwood*, *Gombás* és *Neugebauer* számítási eredményeit, valamint a saját korábbi eredményeimet is figyelembe vettem, (az évszámok feltüntetésével), továbbá felvettem *Náray Zsolt* [10] egyidejűleg megjelent vizsgálatainak az eredményét is.

TÁBLÁZAT

	Disszociációs energia eV-ban	Százalékos hiba	Proton-mag távolság Å-ben	Százalékos hiba
<i>Kirkwood</i>	12,9	9,09	1,29	1,33
<i>Gombás—Neugebauer</i>	11,68	17,68	1,323	3,92
az 1948-as vizsgálatok	16,03	12,96	1,270	0,23
az 1951-es vizsgálatok	12,67	10,71	1,164	8,56
az 1952-es vizsgálatok	12,97	8,59	1,376	8,09
<i>Náray</i>	12,2	14,02	1,35	6,04
A kísérleti érték	14,19	—	1,272	—

A számított disszociációs energiát nem hasonlíthatjuk közvetlenül össze kísérleti értékekkel, mert a táblázatokban a sósavnak klórra és hidrogénre való felbontásához szükséges energia szerepel. Az összehasonlítást egy kör-folyamat segítségével kell tehát végeznünk. [6].

## IRODALOM

- [1] *M. Born—W. Heisenberg*: Zs. f. Phys. 23, (1924), 388.
- [2] *I. G. Kirkwood*: Phys. Zs. 33, (1932), 259.
- [3] *P. Gombás—Th. Neugebauer*: Zs. f. Phys. 92, (1934), 375.
- [4] *D. R. Hartree*: Proc. Roy. Soc. London (A) 141, (1933), 282.
- [5] *D. R. Hartree—W. Hartree*: Proc. Roy. Soc. London (A) 156, (1936), 45.
- [6] *J. I. Horváth*: Experientia 4, (1948), 256.
- [7] *J. I. Horváth*: Zs. f. Phys. 129, (1951), 56.
- [8] *J. I. Horváth*: Acta Phys. Acad. Sc. Hung. 2, (1952), 47.
- [9] *J. I. Horváth*: Zs. f. Phys. 132, (1952), 565.
- [10] *Zs. Náray*: Acta Phys. Acad. Sc. Hung. 2, (1952), 55.

# VAN DER WAALS ÁLLAPOTEGYENLETE\*

JORDAN KÁROLY, akadémikus

1. §. *Van der Waals* állapotegyenletét, mely az anyagok gáz és folyékony állapotára egyaránt érvényes kíván lenni, a következőkép írhatjuk

$$\frac{1}{T} \left( p + \frac{a}{v^2} \right) (v - b) = R, \quad (1)$$

ahol  $v$  a gáz köbtartalma,  $p$  nyomása és  $T$  abszolút hőmérséklete; továbbá  $R$  egy minden gáz esetén azonos állandó.

Ha  $v$  egységeül a gáz köbtartalmát választjuk,  $T = 273$  és egy légnyomás mellett; továbbá  $p$  egységeül a légnyomást; végül  $T$  egységeül a Celsius fokot; akkor, miután tökéletes gázoknál  $vp = RT$ , a választott egységek 1. 1. =  $273 R$  azaz,  $R = 0,003662$ .

A tökéletes gázoknál a molekulák kinetikus energiája fokenként

$$J = \frac{3}{2} \frac{vp}{T} = \frac{3}{2} R = 0,00549.$$

Ennélfogva egy mol esetén, C. G. S. rendszerben  $R = 83,24$  megerg.

Az  $a$  állandó dimenziói ugyanazok mint  $v^2 p$  dimenziói; továbbá  $a/v^2$  a molekulák egymásközi vonzása révén létrejött nyomáscsökkenést fejezi ki. A  $b$  állandó dimenziói ugyanazok mint a  $v$  köbtartalomé. Az (1) formula értelmében  $b$  a molekulák által az abszolút nullfokon elfoglalt teret jelenti.

Az  $a$  és  $b$  állandókat minden gáz esetén külön ki kell számítani. Ezt a számítást rendszeresen a gáz kritikus állandói segélyével hajtják végre. Azonban ez az eljárás nem helyes, először is mert ekkor az (1) felületet egy észlelt ponton át vezetik, tekintet nélkül a többi észlelt pontra; másrészt a kritikus állandók értékei meglehetősen bizonytalanok, miután a kutatók nagyon különböző értékeket találtak. Végül ha  $a$  és  $b$  meghatározására a kritikus állandókat a felület egy bizonyos pontjával hozzuk kapcsolatba, látni fogjuk, hogy három egyenletet nyerünk  $a$  és  $b$ -re, melyek össze nem egyeztethetők, úgy hogy más és más értékeket nyerünk a szerint, amint a három egyenletből kettőt választunk  $a$  és  $b$  kiszámítására. A *Landolt—Börnstein* táblázatban szereplő hosszú sora az  $a$  és  $b$  állandóknak így van kiszámítva, ennél fogva azok önkényes helytelen adatok. Ha az így meghatározott  $a$  és  $b$  értékek felhasználásával az

\* Bemutatta az 1952 november 3-án tartott felolvasó ülésen.



(1) egyenlettel kiszámítjuk a  $p_i, v_i, T_i$  észlelések  $i = 1, 2, \dots, N$  sorozatát megközelítő értékeket, rendesen nagyon rossz eredményt érünk el.

Az  $a$  és  $b$  mennyiségek meghatározására sokkal jobb az észlelési sorozatot a legkisebb négyzetek elve szerint közelíteni meg. De ez esetben is bizonyos elővigyázatra van szükség.<sup>1</sup>

**2. §.** *Van der Waals* tétele értelmében minden gáz esetén az (1) felület minden pontján a molekulák fokenkénti kinetikus energiája konstans, mégpedig

$$J = \frac{3}{2} \left( p_i + \frac{a}{v_i^2} \right) (v_i - b) \frac{1}{T_i} = \frac{3}{2} E_i = \frac{3}{2} R. \quad (2)$$

Először ki kell mutatni, hogy  $E_i$  egy adott gáz esetén független  $i$ -től, azután, hogy a nyert érték minden gáz esetén ugyanaz.

Határozzuk meg az  $a$  és  $b$  állandókat, a legkisebb négyzetek elve szerint oly formán, hogy az  $E_i$  mennyiségeknek  $E_m$  átlaguktól eltérései lehetőleg

kicsinyek legyenek; azonban a megfelelő négyzetes eltérésnek  $\sigma = \sqrt{\frac{\sum (E_i - E_m)^2}{N}}$  elég kicsinynek kell lennie, hogy az eltéréseket mérési hibák következményeinek tekinthessük.

Ha így járunk el, akkor természetesen a nyert formula nem fogja a  $p_i, v_i, T_i$  észlelések legjobb megközelítését adni, számításunknál nem az a cél vezetett; de azért ki kell mutatni, hogy az eredmény e szempontból is elfogadható.

A számítások végrehajtására válasszuk először is *Andrews* szénsavra vonatkozó adatait.<sup>2</sup> (Kivéve a kritikus adatokat, amelyek *Amagat*-tól származnak.)

I. Táblázat

$i$	$v_i$	$p_i$	$T_i$	$E_i$	$E_i - E_m$	$p_i - \bar{p}_i$
1	0,07921	12,01	279,89	0,00361	-0,00004	-0,22
2	5371	17,69	279,45	369	4	0,18
3	3462	24,81	279,73	353	-12	-1,10
4	2224	34,49	279,02	346	-19	-2,63
5	6671	17,60	336,86	367	2	0,04
6	3560	31,39	336,82	366	1	3,25
7	1871	54,33	336,57	365	0	-0,10
8	1083	81,11	336,75	367	2	0,21
9	7628	17,42	373,39	369	4	0,18
10	4158	31,06	373,64	370	5	0,41
11	2277	53,81	373,34	373	8	-1,15
12	1000	105,69	373,37	377	12	3,91
c	423	72,9	304,35	366	1	-0,02

A számításokat végrehajtva  $a = 0,0060$  és  $b = 0,0015$  eredményre jutunk. Az, ez állandóknak, a (2) képlet szerint megfelelő  $E_i$  mennyiségek a táblázat ötödik oszlopába vannak írva. Ezek átlaga  $E_m = 0,00365$ . Miután az ennek megfelelő négyzetes eltérés csupán

$$\sqrt{\frac{1}{13} \sum (E_i - E_m)^2} = 0,00007,$$

ennél fogva elfogadható, hogy  $E_i$  állandó; ki kell emelni, hogy a kritikus értéknél is. Azonkívül látjuk, hogy a nyert  $E_m$  érték csak 0,00001-gyel különbözik  $R$ -től, úgy hogy azzal egyenlőnek tekinthető.

Ezzel a tétel első része ki van mutatva; azonban az a körülmény, hogy szénsav esetén az állandó egyenlő az  $R$  univerzális állandóval, arra mutat, hogy az valószínűleg a többi gáz esetén is úgy lesz. Ennek megvizsgálására ismételjük meg számításainkat *etilén* esetén. Az alábbi táblázatban levő  $p_i$ ,  $v_i$  és  $T_i$  értékek *Van der Waals* adatai.<sup>3</sup> (Kivéve a kritikus adatokat, melyekre a *Landolt—Börnstein* táblázatban felsorolt *Van der Waals*, *Dewar*, *Cailletet*, *Malines*, *Ansdall* és *Pickering*-féle adatok átlagait választottuk.)

II. Táblázat

$i_i$	$p_i$	$V_i$	$T_i$	$E_i$	$E_i - E_m$	$p_i - \bar{p}_i$
1	15,63	0,064	291	0,00365	0,	-0,14
2	23,75	0,040	291	360	-0,00005	-0,43
3	48,50	0,01599	291	350	— 15	-3,32
4	17,50	0,064	323,2	365	0	-0,06
5	26,85	0,40	323,2	362	-0,00003	-0,35
6	53,15	0,01776	323,2	358	— 7	-1,56
7	20,50	0,064	372,6	367	2	0,07
8	32,50	0,040	372,6	373	8	0,66
9	57,75	0,0205	372,6	364	— 1	-0,28
10	25,70	0,064	455,8	372	7	0,44
11	40,20	0,040	455,8	371	6	0,55
12	62,05	0,02508	455,8	370	5	0,72
c	53,3	0,00468	283,5	366	1	-0,34

A számítások végrehajtása  $a = 0,0050$  és  $b = 0,0010$  eredményre vezetett. Az ez értékeknek megfelelő  $E_i$  mennyiségek a táblázatban fel vannak sorolva. Átlaguk  $E_m = 0,00365$  és négyzetes eltérésük 0,00007; pontosan ugyanaz az eredmény, mint szénsav esetén, tehát  $E_i$  itt is állandó és egyenlőnek tekinthető  $R$ -rel; a kritikus adatok esetén is.

Annak a kimutatására, hogy az (1) formula az így kiszámított  $a$  és  $b$  értékek segítségével elég jól közelíti meg az észlelési adatokat is, a két táblázat utolsó oszlopába írtuk a megfigyelt  $p_i$  és az (1) egyenlettel kiszámított  $\bar{p}_i$  mennyiségek eltéréseit. Miután ezek nem túl nagyok a megközelítés elfogadható. Az eltérések nem sokkal nagyobbak, mint például azok, melyeket *Jellinek*<sup>4</sup> kapott, noha ő minden izotermára külön  $a$  és  $b$  értékeket határozott meg, az  $a$  és  $b$  mennyiségeket a hőmérséklet függvényének tekintve.

Ezek után igen valószínűvé válik az, hogy a (2) energia a legtöbb gáz esetén  $\frac{3}{2}R$ -rel lesz egyenlő, úgy hogy *Van der Waals formulája* igazoltnak tekinthető. Az eddigi nehézségeket az  $a$  és  $b$  állandóknak helytelen meghatározása okozta.

Jó lenne azonban még több gáz esetén megfigyelni a  $p_i$ ,  $v_i$  és  $T_i$  értékeket és azok segítségével a számítást megismételni.



**3. §. A Van der Waals pont.** Ha az (1) felületnek megfelelő izotermákat vizsgáljuk a  $p, v$  koordináta rendszerben, látjuk hogy  $T$  elég alacsony értékénél az izoterma a  $v > b$  szakaszon egy minimummal és egy maximummal bír. A  $p = k$  egyenes, ha  $k$  a két szélső értéknek megfelelő nyomás közé esik, az izotermát három pontban metszi. Ha a hőmérséklet emelkedik a három metszési pont közeledik egymáshoz, valamint a szélső értékek is. Egy bizonyos  $T_0$  hőmérsékletnél e pontok egy pontba esnek össze. Az izotermának ott inflektációs pontja van, melyen az érintő párhuzamos a  $p$  tengellyel. E pontot *Van der Waals pontnak* nevezzük és koordinátáit  $p_0, v_0, T_0$ -val jelöljük.

Ezek meghatározására számítsuk ki az (1) egyenletből  $p$  értékét

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2} \quad (4)$$

és írjuk, hogy bizonyos  $p$  és  $T$  értékek esetén ez egyenletnek  $v$ -ben háromszoros gyöke van. Ekkor  $\frac{dp}{dv} = 0$  és  $\frac{d^2p}{dv^2} = 0$ ; e három egyenletből következik, hogy

$$v_0 = 3b \quad (4), \quad p_0 = \frac{a}{27b^2} \quad (5), \quad T_0 = \frac{8a}{27bR} \quad (6).$$

Ha ez egyenletekből az  $a$  és  $b$  paramétereket kiküszöböljük az alábbi eredményre jutunk

$$\frac{v_0 p_0}{T_0} = \frac{3}{8} R = 0,00137. \quad (7)$$

Miután tökéletes gázoknál  $vp/T = R$  következöleg a *Van der Waals ponton* bármely gáz molekuláinak fokenkénti kinetikus energiája három nyolcada a tökéletes gázokénak; vagyis ez az energia a gázoknál e ponton 46,82 megerg-gel egyenlő mol-onként.

A *Van der Waals* pont koordinátái az előző képletek szerint *szénsav* esetén

$$v_0 = 0,0045 \quad p_0 = 98,76 \quad T_0 = 323,56$$

és *etilén* esetén:

$$v_0 = 0,0030 \quad p_0 = 185,18 \quad T_0 = 404,78$$

Ez értékek pontosan  $v_0 p_0 / T_0 = 0,00137$ -et adnak.

Vezessük be az (1) egyenletbe a következő új változókat:

$$\varphi = v/v_0, \quad \psi = p/p_0 \quad \text{és} \quad \vartheta = T/T_0;$$

ekkor

$$\left( \psi p_0 + \frac{a}{\varphi^2 v_0^2} \right) (\varphi v_0 - b) = T_0 R \vartheta,$$

miután

$$a = 3p_0 v_0^2 \quad b = v_0/3 \quad \text{és} \quad v_0 p_0 / T_0 = 3R/8$$



következőleg, ha az előző egyenlet mindkét oldalát  $p_0 v_0$ -val osztjuk:

$$\left(\psi + \frac{3}{q^2}\right)(3q - 1) = 8\vartheta \quad (8)$$

eredményt kapjuk. Ez a *redukált-állapotok* egyenlete, melynek minden anyagra egyaránt érvényesnek kellene lennie.

**4. §.** A *gázok kritikus állandói*. A *gáz kritikus hőmérséklete*  $T_c$  az a legmagasabb hőmérséklet, amelynél a gázt még lehet cseppfolyósítani. Ezt a fogalmat *Andrews* vezette be. A *gáz kritikus nyomása*  $p_c$  az a legkisebb nyomás, amelynél  $T_c$  hőmérsékletnél a gázt még cseppfolyósítani lehet. Ha az egységnyi köbtartalmú gázt ( $T = 273$  és  $p = 1$ -nél) felmelegítjük  $T_c$  hőmérsékletre és  $p_c$  nyomás alá hozzuk, akkor köbtartalma, a *kritikus köbtartalom*  $v_c$  lesz és sűrűsége a *kritikus sűrűség*  $\delta_c$ . Ez utóbbi két mennyiség között  $v_c = M/22410\delta_c$  kapcsolat áll fenn, ahol  $M$  a gáz molekuláris súlya. A *kritikus pont* az a pont, melynek koordinátái  $p_c$ ,  $v_c$  és  $T_c$ . Ez állandókat kísérletileg kell meghatározni.

A kritikus adatokat rendszerint úgy kívánták levezetni *Van der Waals* formulájából, hogy azonosították a kritikus pontot a *Van der Waals ponttal*; továbbá a kritikus állandókat az  $a$  és  $b$  értékekből kiindulva a (4), (5) és (6) egyenletekkel kifejezni; vagy viszont az  $a$  és  $b$  állandókat a kritikus adatokból az egyenletekkel meghatározni.

Ez a felfogás téves, ugyanis a tapasztalat mutatja, hogy a kritikus állandók még megközelítőleg sem tesznek eleget a (7) feltételnek, aminek következtében a (4), (5) és (6) egyenletek összeegyeztethetetlenekké válnak. Mintegy száz esetben ismerjük a gázok három kritikus állandóját, valamennyi esetén  $v_c p_c / T_c$  lényegesen kisebb, mint 0,00137. E gázok körülbelül 82 százaléknál ez az állandó 0,00088 és 0,00100 közé esik. Átlaguk 0,00100. *Sydney Young* nagyszámú esetben 0,00097 eredményt talált.

Dacára annak, hogy a kritikus adatok, tekintettel a nagy eltérésekre, melyek az egyes észlelők adatai között mutatkoznak, eléggé bizonytalanok, még sem lehet elfogadni azt, hogy  $v_c p_c / T_c$ -nek 0,00137-től észlelt eltérései véletlen hibáknak legyenek tulajdoníthatók; ugyanis azok túl nagyok és mind egy irányúak; amit csak a kritikus állandók szisztematikus hibájával lehetne magyarázni, de ez nagyon valószínűtlen.

Ha a *Van der Waals* egyenletébe bevezetett új változókat a kritikus állandókra kívánnánk vonatkoztatni

$$\psi = p/p_c \quad q = v/v_c \quad \text{és} \quad \vartheta = T/T_c.$$

akkor tekintettel, hogy (7) nincs kielégítve, a (8) egyenlet érvénytelenné válna.

Ha azt kívánnánk, hogy valamely állapot egyenlet megközelítőleg jó numerikus eredményt adjon: a (2) energiára, a kritikus állandókra, az izotermákon  $p v$  minimumára és végül, hogy közelítse meg a  $p_i v_i$  és  $T_i$  észleléseket  $i = 1, 2, 3 \dots N$ -re, akkor az egyenletnek legalább négy-öt rendelkezésre álló



paramétert kellene tartalmaznia. Ha tekintetbe vesszük a *Van der Waals* formulájával két paraméterrel elért eredményeket, azokat meglepő jóknak kell minősíteni.

Valamely elfogadhatóan pontos állapotegyenlet igen nagy fontossággal bírna, mondja *Von der Waals*, mert termodinamikai meggondolások segítségével bepillantást nyújtana az anyag szerkezetébe; ez az oka annak, hogy annyian törekedtek az (1) egyenletet megjavítani vagy esetleg újjal cserélni fel, mint például *Clausius*, *Tait*, *Amagat*, *Boltzmann*, *Jäger*, *Dieterici*, *Galitzine*, *Rose Innes*, *Reinganum* és sokan mások. Eddig azonban ez nem sikerült. A szerző is ezen fáradozik.\*

### Összegezés

1. Ez értekezésben ki van mutatva, hogy az a módszer, amelyet csak nem mindég alkalmaztak *Van der Waals* egyenletének  $a$  és  $b$  paramétereinek meghatározására, a kritikus állandók segélyével, helytelen és rossz eredményekre vezet. Ennélfogva a hosszú sorozata az  $a$  és  $b$  állandóknak, melyet *Landolt—Börnstein* táblázata évtizedek óta közöl, hasznavehetetlen, továbbá, hogy az eddig alkalmazott redukált-állapotegyenlet, mely a kritikus állandókkal függ össze, ennek következtében szintén hibás.

2. Az  $a$  és  $b$  paraméterek meghatározására kifogástalan módszer van adva. Az azzal elért eredmények segélyével be van bizonyítva *Van der Waals* egy igen fontos tétele; továbbá a formula a nyert  $a$  és  $b$  értékekkel jó megközelítést adja az észleléseknek, bele értve a kritikus adatokat is. Végül be van vezetve az észleléseknek jól megfelelő, szigorú redukált-állapotegyenlet.

3. Ki van mutatva, hogy *Van der Waals* formulájával nem lehet a kritikus adatokat meghatározni, további paraméterek bevezetése nélkül.

### IRODALOM

<sup>1</sup> Lásd: *Jordan*, Észlelések törvényszerűségének megállapítása több változó esetén. Magy. Tud. Akadémia Matematikai és Fizika Osztályának közleményei. Budapest, 1950.

<sup>2</sup> *Thomas Andrews*, Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Vol. 166.

<sup>3</sup> *Johannes Diderick Van der Waals*, „La continuité des États Gazeux et Liquide.” Paris, 1894. 123—124.

<sup>4</sup> *Karl Jellinek*, Physikalische Chemie, Bad I.

\* Ez az értekezés az 1952 november 3-i Akadémiai előadás második részét képezte.

# ELJÁRÁS NAFTALIN EGYKRISTÁLYOK ELŐÁLLÍTÁSÁRA\*

UJHELYI SÁNDOR

Orvosi Fizikai Intézet, Budapest

A naftalinnak, antracénnek és más fluoreszkáló anyagoknak a  $\beta$  és  $\gamma$  sugarak számlálására való felhasználása szükségessé teszi ezeknek a vegyületeknek nagy egykristályban való előállítását. Az irodalomban *Charles E. Feazel* és *C. Dixon Smith*<sup>1</sup>, valamint *Hendricks* és *Jefferson*<sup>2</sup> közleménye foglalkozik naftalin egykristályok előállításával. Mindkét szerző *Bridgeman*<sup>3</sup> eljárása szerint dolgozott. Az eljárásnak az a lényege, hogy a naftalint az egyik végén kapilláris csővé kihúzott és leforrasztott üvegcsőbe helyezik, a csövet a másik végén evakuálják és leforrasztják. Az így elkészített csövet lassan süllyeszti le egy csőalakú, függőleges helyzetben lévő elektromos kemencéből, amelyet a naftalin olvadáspontja fölé fűtenek. Az alul elhelyezett kapilláris csőnek az a rendeltetése, hogy annak az olvadáspont alá lehülő végében lehetőleg egy pontból induljon el a kristályosodás és ez biztosítsa az egykristály keletkezését.

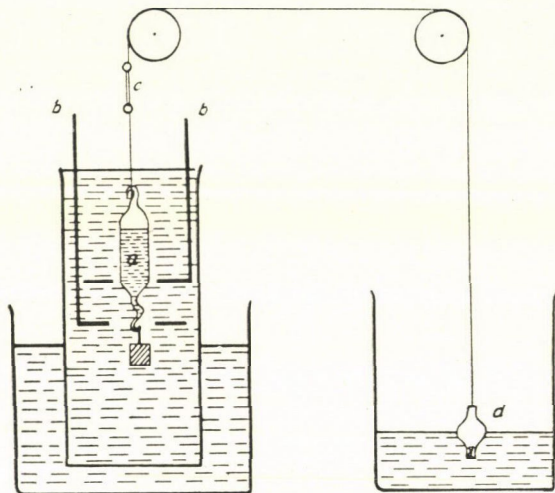
Az eljárás alkalmas naftalin egykristályok előállítására, de a következő hátrányai vannak. A lefelé süllyedő csőben a már kialakult naftalinkristály és a még növekedésben lévő felső szint hőmérséklete között lényeges hőmérsékletkülönbség alakul ki, amely feszülésekhez és gyakran a kristály megrepedéséhez vezet. A légáramlások következtében a hőmérsékletesés eltolódhat, s amennyiben a kristály és az olvadék határfelületén a hőmérséklet csökken, új kristálymagok keletkezése zavarja meg az egykristály növekedését. — A naftalin több fokkal hűthető túl olvadáspontja alá. A túlhűtésnél az egész túlhűtött részben megindulhat a kristályosodás, több kristályosodási mag keletkezhet. Ha elég hosszú darabon olvadék tölti ki még a kapillárist, a keletkezett sok kristály legnagyobb része kedvezőtlen térbeli orientációja miatt kiszorul a további növekedésből, de gyakran nem egy, hanem két-három kristály jut ki az edény tágabb részébe és ezek egymás mellett nőnek tovább. Ez a körülmény csökkenti a nyerhető egykristályok nagyságát. Mindezek a hátrányok fokozottabban jelentkeznek, ha az egykristály nagyságát növelni akarjuk.

A naftalin egykristályainak az előállításához olyan készüléket (lásd az 1. ábrát) állítottam össze, amellyel a fenti hátrányok kiküszöbölhetők, illetve

\* Érkezett 1953. január 20.



csökkenthetők, ezen kívül a berendezés lehetővé teszi a kristályosodás menetének állandó ellenőrzését. A naftalint tartalmazó üvegcsövet (a) levegő helyett folyadékfürdőben (28 cm magas, 3 liter űrtartalmú főzőpohárban) süllyesztettem, amelynek alsó részét egy másik vízfürdővel vettem körül. A belső fürdő 0,005 normál nátriumhidroxidoldatból állt, amelyet gyűrűalakú vörösréz-elektrodok (b) segítségével a hálózati váltóárammal melegítettem. A külső vízfürdő melegítésére termoregulátor közbeiktatásával világítógázt használtam.



1. ábra. A naftalin egykristályok növesztéséhez használt berendezés.

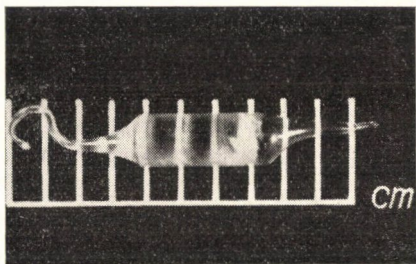
A belső fürdő hőmérsékletét változtatható ellenállással úgy szabályoztam, hogy az alsó elektród fölötti tartományban a hőmérséklet néhány fokkal magasabb legyen a naftalin olvadáspontjánál. ( $80^{\circ}\text{C}^{\circ}$ ). A külső fürdő az alsó tartományt körülbelül 1 cm-rel az alsó elektród alatt  $76^{\circ}\text{C}^{\circ}$ -on tartotta. A növekedés az alsó elektród alatti 1 cm-es tartományban játszódtott le, amelyben néhány  $^{\circ}\text{C}^{\circ}$ -os hőmérsékleteséssel halad át a kristály. A hőmérséklet-gradiens vékony falú kapilláris csőbe helyezett, egyetlen ponton forrasztott termoelemmel kimérve kb.  $0,4^{\circ}\text{mm}$ -nek adódott. A kristályosítás befejezése után a külső fürdő hőmérsékletét a kristállyal együtt lassan (8–10 óra alatt) csökkentettem a szoba hőmérsékletére, hogy elkerüljem a gyors lehűtéssel együttjáró hasadásokat.

A két fürdő vizének erős párolgása miatt gondoskodnom kellett az elpárolgó víz pótlásáról. Hogy a pótlásul szolgáló víz a fürdők hőmérsékletét ne változtassa meg, a két fürdőt héberek segítségével külön-külön túlfolyóval ellátott szinttartó edénnyel kötöttem össze. A héberek kissé magasabban lévő végére, ahol a hébér derékszögben hajlott, egy zárt toldalékcövet alkalmaztam, hogy a vízben oldott levegőtől származó és a hébérben meggyűlő lég-

buborékok az összefüggő folyadékoszlopot a többnapos növesztés alatt ne szakítsák meg. (A hébéreket és a szinttartó edényeket az ábrán nem tüntettem fel.)

Az egykristály növekedésének biztos elindítását úgy sikerült elérnem, hogy a naftalint tartalmazó edény alsó kapillárisát S-alakban meghajlítottam. A kristályosítás megindításakor a kapilláris alsó végét addig hűtöttem túl, míg a kristályosodás megindult. Ezután az edényt megemeltem, hogy a meghajlított kapilláris legalsó részében maradjon meg csak a kristály, a fölötte lévő részben pedig beolvadjon. Az ezt követő lassú süllyesztéskor a növekvő egykristályok közül végül is csak egy tudta a kapilláris cső kanyarulatait követni, és a kanyarulatok után már csak az az egykristály növekszik tovább.

A kristály hibátlan növekedéséhez igen lassan és egyenletesen kell az olvadékot tartalmazó edényt az olvadáspont alatti hőmérsékletre lesüllyeszteni. Ezt a süllyesztést úgy oldottam meg, hogy a kristályt tartalmazó edényt ólomnehezékekkel láttam el, a felső végéhez pedig vékony ezüstdrótot erősítettem. Mivel a dróttal érintkező nátriumhidroxidos fürdő feszültség alatt állt, szigetelés céljából 3—4 cm hosszú üvegcsövet (c) iktattam közbe. A drótot két csigán vezettem át és a másik végére üvegből való úszótestet (d) függesztettem. Az úszó 10 literes edényben vízen úszott, a víz szintjét egyenletes áramban hozzácsepegő víz lassan emelte.



2. ábra. 12 mm átmérőjű naftalin egykristály.

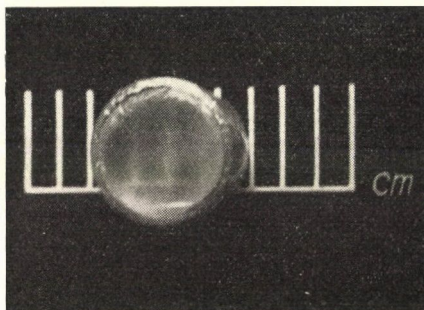
A növesztéshez használt naftalint minden esetben kétszer desztilláltam. A második desztilláláskor az átdesztilláló naftalint közvetlenül a növesztésre használt üvegcsőben fogtam fel. Megtöltés után az üvegcsövet vízlégszivattyúval 10 Hgmm nyomásig kiszívattam, az üvegcsőben lévő naftalint enyhe melegítéssel megolvasztottam és a szivatást addig folytattam, míg a naftalin a csőben kikristályosodott. Ezután az üvegcsövet vákuumban leforrasztottam.

Kísérleteim arra az előrelátó eredményre vezettek, hogy a hibátlan egykristályt eredményező növesztés sebessége függ a kristály átmérőjének nagyságától. A 12 mm belső átmérőjű üvegcsővekben növesztett kristályok (2. ábra) hibátlan növekedést mutattak még 6—7 mm/óra növesztési sebesség



esetében is, míg a 35 mm átmérőjű csövekben növekedő kristályt legfeljebb 3—4 mm/óra sebességgel növeszthetjük, hogy a növekedés tiszta legyen.\*

A tiszta kristályokban is megfigyelhetők voltak bizonyos optikai inhomogenitások. Már a növesztés alatt a kristály idősebb részében finom fonalas szerkezet jelentkezett, amelyekben a fonalak egymással közelítőleg párhuzamosak, kissé görbültek, a nagy kristályokban gyengén csavart lefutásúak, és irányuk nem egyezik meg sem a növekedés, sem a kristály hasadásának irányával. A jelenség magyarázata további vizsgálatokat kíván.



3. ábra. 35 mm átmérőjű naftalin egykristály cellofánnal lezárt üvegcsőben.

A kristályokat fluoreszcencia-vizsgálatok céljából csiszoltam. A csiszolást igen lassan és óvatosan kell végezni, mert a nagyobb kristályokban csiszolás közben a felületről kiinduló finom hasadások jelentkeznek. A csiszolást először alkohollal nedvesített, lecsapott kalciumkarbonáttal végeztem, majd a síma felületet tiszta szarvasbőrön políroztam. Polírozás után a kristályokat azonnal légmentesen el kell zárni, mert a felület a naftalin szublimációja következtében másodperceken belül elhomályosodik.

\* A megadott növesztési sebességek nem egyeznek meg a leeresztési sebességekkel. Ennek oka a hálózati feszültség ingadozása, amelyet jelenlegi kísérleteinkben még nem állt módunkban kiküszöbölni. A hálózati feszültség változása lassú hőmérsékletváltozást hoz létre a fürdő belsejében, amely az alsó elektród alatt 1 cm-es tartományban az izotermákat eltolja. A termoelemmel végzett mérések szerint a feszültségváltozás maximálisan kb. 2—3 mm/óra sebességgel tolta el pl. a 80 C°-hoz tartozó izotermát. A kristály növekedésének sebessége tehát kísérleteinkben nem volt egyenletes. A hálózati feszültség esésekor az izoterma eltolódása a süllyesztéshez hozzáadódott, a feszültség növekedésekor pedig kivonódott. A fent közölt maximális növesztési sebességet úgy kapjuk meg, ha az 1—4 mm/óra leeresztési sebességhez hozzáadjuk a feszültségcsökkenésből eredő 2—3 mm/óra értéket. Ha a feszültségcsökkenés a több napos kristályosítás alatt időnkint olyan értéket ér el, amelynek következtében az izoterma-eltolódás a fenti értéket meghaladta, a növekedés zárva nyos lett, vagy az egykristály felületén újabb kristályok keletkeztek. Ilyenkor a kristályt a zavaros növekedés mértékének megfelelően néhány mm-rel visszaemeltém és a hibás részt beolvasztottam. Az ilyen részleges beolvasztás után az egykristály ismét tisztán növekedett.

Eltartás céljából a kristályt a hengeres oldalán vékony fényes alumínium-lemezzel vettem körül, azután egy vele egyenlő hosszúságú és 1 mm-rel nagyobb átmérőjű üvegcsőbe helyeztem az alumínium-burkolattal együtt. Az üvegcső két végét cellofán-lemezzel ragasztottam le. (3. ábra.) Az egyik cellofánlemezt az üvegcsőre már a polírozás előtt felragasztottam, az üvegcsőbe a burkoló alumíniumlemezt is előre belehelyeztem, hogy a polírozás után a kristályt pillanatok alatt elzárhassam.

A dolgozat a budapesti Orvostudományi Egyetem Orvosi Fizikai Intézetében készült. Köszönetet mondok az intézet vezetőjének, dr. Tarján Imre egyetemi tanárnak, aki munkámat mindvégig meleg érdeklődéssel kísérte, és tanácsaival hathatósan támogatott.

#### IRODALOM

1. *Charles E. Feazel és C. Dixon Smith*: Rev. of Scient. Instrum. 1948. 19. 817.
2. *Hendricks és Jefferson*: Journ. of Opt. Soc. Am. 1933. 23. 299.
3. *Bridgeman*: Proc. Am. Acad. Arts Sciences 1925. 60. 303—383.





# SZÍNCENTRUMOK ALKALIHALOGENID KRISTÁLYOKBAN\*

TARJÁN IMRE

Orvosi Fizikai Intézet, Budapest

Az alkalihalogenid kristályok vizsgálata a kristályszerkezet egyszerűsége miatt alapvető jelentőségű a szilárd testek tulajdonságainak megismerésében. Az alkalihalogenid kristályokon elért eredmények jól értékesíthetők azután más, bonyolultabb felépítésű anyagok vizsgálatában.

Az alkalihalogenid kristályokon végzett széleskörű kutatások közül a következőkben az ú. n. színcentrumok néhány tulajdonságával foglalkozom. Olyan problémakörrel van szó, amely összefügg a fizika számos területével. A színcentrumok vizsgálata alapvető jelentőségű pl. a belső fényelektromos hatás, a félvezetők, a különböző fotokémiai folyamatok mechanizmusának felderítésében és értékes szempontokat nyújt a fémes vezetés mechanizmusának vizsgálatához is. Minthogy ezek a területek a hazai kutatások homlokterében állanak, úgy gondolom, hogy egy rövid beszámoló a színcentrum-problémával kapcsolatban érdeklődésre tarthat számot. A vizsgálatokkal kapcsolatban ki kell emelnünk a Pohl-iskola kb. három évtizedes szisztematikus munkáját, amely a vizsgálatok elindítója volt, és nevéhez alapvető eredmények fűződnek, továbbá szovjet kutatók vizsgálatait, akik különösképpen a félvezetés mechanizmusának tisztázásában értékcsináltak és továbbfejlesztették az eredményeket. Hazai vonalon *Gyulai Zoltán* akadémikus munkássága alapvető ezen a téren és értékes adatokkal szolgáltak *Gyulai* tanítványai is.

1. *F-centrumok létrehozása és természete.* Néhány évtizede ismert jelenség, hogy alkalihalogenid kristályok röntgensugárzás hatására színeződnek (Röntgen 1921.): pl. NaCl borostyánsárgára, KCl kékesvörösre, KBr kékre, stb. A színeződés következtében fellépő abszorpciós sávot *F-sávnak* nevezik. (1. ábra). Egyszerű felépítésű rezonancia-görbéről van szó, amely a kristály ultraibolyában lévő abszorpciójától (az ábra bal szélén) jól elkülönülten jelentkezik. Az abszorpciós maximum szobahőmérsékleten NaCl esetében kb. 460  $m\mu$ -nál, KCl esetében kb. 560  $m\mu$ -nál, KBr-nél kb. 630  $m\mu$ -nál fekszik.

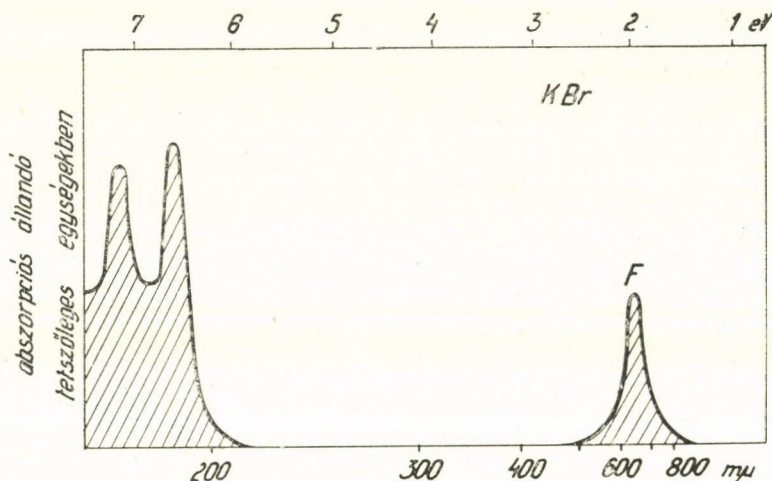
Az *F-sávot* más módon is létrehozhatjuk:

a) A kristályt az ultraibolya tartományba eső saját abszorpciójának hosszuhullámú lejtőjén, az ú. n. „abszorpciós kifutási tartomány”-ban világítjuk meg. Az ultraibolya fénnel és röntgensugárral, illetőleg gamma sugárral végzett színezést közös néven *fotokémiai* színezésnek nevezzük.

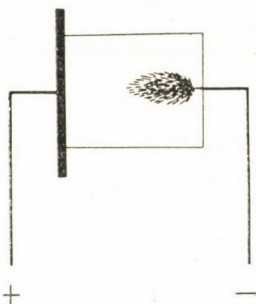
\* Érkezett 1953. febr. 12.



b) A kristályt 50—100 C°-al olvadáspontja alatt alkalgőzők jelenlétében (vagy folyékony alkalicfémekben) hevítjük, majd hirtelen (másodperc nagyságrendű idő alatt) szobahőmérsékletre vagy még alacsonyabb hőmérsékletre lehűtjük. Ilyenkor beszélünk *additív színezésről*.



1. ábra. Röntgenezett KBr kristály abszorpciós spektruma.  
Baloldalon az ultraibolyába eső „saját” abszorpció, jobboldalon az F-sáv



2. ábra. F-centrumok létrehozása elektromos eljárással

c) A kristályba hegyes katódon keresztül elektronokat diffundáltatunk olyan magas hőmérsékleten, amelyen már különben jól mérhető ionvezetés lép fel. Az elektronok színes felhőként vándorolnak a túalakú katódtól a lemez alakú anód felé (2. ábra).

d) Színezhethetjük a kristályt korpuszkuláris sugárzással ( $\alpha$ ,  $\beta$ , katódsugár) is. A keletkezett F-sáv a színezés módjától független, helyzete az illető kristályra jellemző és a rácsállandóval hozható összefüggésbe. Az abszorpciós maximumhoz tartozó hullámhosszat  $\lambda_0$ -val, a rácsállandót  $d$ -vel jelölve,

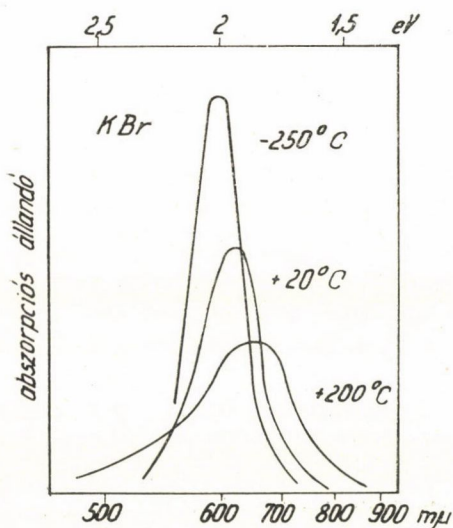
$$\lambda_0 = \text{konstans} \cdot d^2$$

Minden rezonanciagörbe jellemzésénél fontos adat a görbe szélessége is,

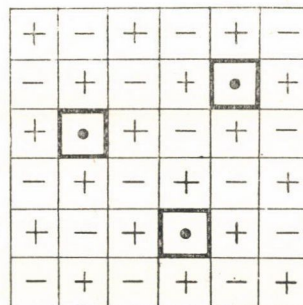
amelyet a görbe magasságának a felében mérnek. Ez az ú. n. félérték-szélesség ( $H$ ) is a rácsállandótól függ:

$$H = \text{konstans} \frac{1}{d^2} *$$

A kristály színe a hőmérséklettel változik, éspedig az  $F$ -sáv a hőmérséklet csökkenésével rövidebb hullámhosszak felé tolódik, miközben félérték-szélessége csökken (3. ábra). Úgy látszik tehát, hogy az  $F$ -sáv hasonló módon viselkedik, mint bármilyen más rezonancia sáv, amelynek elmélete a klasszikus elektrodinamikából jól ismert.



3. ábra. Az  $F$ -sáv helyzete KBr-ban különböző hőmérsékleteken



4. ábra. Az  $F$ -centrumok sematikus ábrázolása. A pontok a halogénion-hiányosságokban fogságba esett elektronokat jelentik

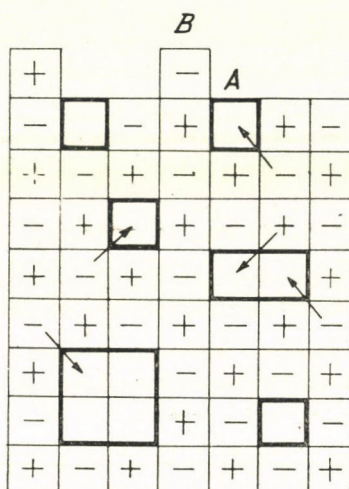
Az  $F$ -sáv létrejöttét úgy képzeljük, hogy a színezési eljárások alatt a kristály bizonyos helyein valamilyen új állapotok, a normális kristályállapothoz képest „zavarok” lépnek fel, amelyek másképpen abszorbeálnak, mint a normális kristályrács. A fentiek alapján fel kell tételeznünk, hogy ezek a zavarhelyek a kristályban azonos természetűek. E helyeket  $F$ -centrumoknak nevezzük. Jelenlegi felfogásunk szerint az  $F$ -centrumok halogén-hiányosságokban fogságba esett elektronok. Ez elképzelést a 4. ábra alapján szemléltetjük, ahol az alkali-ionokat +, a halogén-ionokat — jellel, a fogságba esett elektront pedig ponttal jelöltük. A fogságba esett elektron a szomszédos alkali-ionok valamelyikével alkali-atomot képez. NaCl esetében tehát Na, KCl esetében K,

\* Mindkét összefüggés közelítőleg érvényes, éspedig csak olyan alkalihalogenidekre, amelyek lapon centrált hexaéderekben kristályosodnak, mint pl. NaCl, KCl, KBr, stb. Nem érvényesek pl. CsCl, CsBr, CsJ kristályokra.



stb. atomokra lehet gondolni. Ezeket az atomokat dielektrikum, az ionokból álló kristályrács veszi körül, amely tulajdonságait megszabja.

Az  $F$ -centrumok kialakulása a különböző színezési eljárásoknál bonyolult folyamat eredménye. Két esettel foglalkozom csupán, az additív színezésnél, és a röntgensugárral történő színezésnél végbemenő folyamatokkal. Ezek alapján más színezési eljárásoknál végbemenő folyamatokról is könnyen képet alkothatunk magunknak. — Tudjuk, hogy tökéletes kristály nincs, ez épp oly határeset, mint a tökéletes szigetelő. A rácsban mindig vannak hibák. NaCl kristályokban pl. bizonyos helyeken klór-, más helyeken nátrium-ion-hiányos-



5. ábra. Hiányhelyek kialakulása és vándorlásuk alkali-halogenid kristályokban (Schottky-féle defektusok kialakulása)

ságok vannak. (5. ábra). Ezek kialakulása szublimációhoz hasonló folyamat eredménye, amely folyamat kisebb-nagyobb mértékben minden hőmérsékleten végbemegy. Ha egy felületi ion pl. az  $A$ -helyről  $B$ -helyre mozdul, akkor régi helyén hiányosság jön létre. Ionvándorlás folytán (az ionvándorlást az ábrában nyilak jelzik) a hiányosságok a kristály belseje felé diffundálnak és így bizonyos idő alatt a kristályban minden hőmérsékleten egyenletes hiányosság-eloszlás jön létre. Az ellentétes előjelű ionhiányosságok között lévő elektrosztatikus vonzás következtében hiányosság-párok, sőt nagyobb csoportosulások is előfordulhatnak. Utóbbiak állandó felbomlásban és asszociálódásban lehetnek. A hiányosság-helyek száma és milyensége, valamint vándorlási sebessége a hőmérséklettel nő és minden hőmérsékleten termodinamikai egyensúly áll fenn a kristály és a benne lévő hiányosságok között. Az említett rácshibákat termodinamikai eredetű hibahelyeknek nevezzük. Az  $F$ -centrumokhoz szükséges hiányosságok, jelen esetben halogén-hiányosságok, tehát már eleve jelen vannak a kristályban. Azt kell csak elmondani, hogy honnan jutnak elektro-



nok a halogén-hiányosságokba. Additív festés esetében a gőztérben lévő alkali-*atomok* kémiai reakcióba lépnek a kristály felületén lévő halogén-ionokkal, miközben ott új alkalihalogenid molekulák képződnek. Az alkali-atomból szabaddá vált elektron pedig fogságba esik a felületen vagy ennek közelében lévő halogén-hiányosságban. Előbb tehát a felületen képződnek *F*-centrumok, amelyek azután elektrondiffúzió révén jutnak a kristály belsejébe, amikor a diffundáló elektron egy halogén-hiányosságban fogságba esik. Az elképzelést nem bonyolítja az sem, ha arra gondolunk, hogy a kristály belseje felé diffundáló elektron nem magányos halogén üregbe jut, hanem pl. egy hiányosságpárban esik fogságba. Ilyenkor ugyanis meglazul az alkali hiányosság-partner kötése és utóbbi csakhamar leszakad — alkali-ionok vándorlása folytán eldiffundál — és visszamarad az *F*-centrum.

Hogyan alakulnak ki *F*-centrumok röntgensugár hatására? A röntgensugár a kristály különböző helyein elektronokat tesz szabaddá, pl. egy halogén-ionból kiüt egy elektront. Ez az elektron halogén-hiányosságban fogságba esve *F*-centrumot alakít ki. A tárgyalt két festési eljárás között, ámbár mindkettő ugyanolyan centrumot alakíthat ki, mégis lényeges különbség van. Additív festésnél (tűalakú katóddal való festésnél is) halogén-ionok távoznak a kristályból, fotokémiai színezésnél viszont a halogén alkotórész száma a kristályban nem változik, csupán elektronok változtatják helyüket. Éppen ezért a fotokémiai úton színezett kristályok gyorsan elszíntelenedhetnek (pl. 200—300 C°-ra való melegítéssel), ha az elektronok visszakerülnek az elhagyott helyekre.

2. *F*-centrumok számának meghatározása. Az *F*-centrumokról alkotott elképzelés jogosultságát jól alátámasztják azok a különböző módon végrehajtott mérések, amelyekkel az *F*-centrumok számát meghatározhatjuk.

a) *Optikai mérés.* Az abszorbeáló centrumokat parányi oszcillátoroknak tekintve, a fény klasszikus elektromágneses elméletéből levezethető egy összefüggés, amely szerint az 1 ccm kristályban lévő *F*-centrumok száma,

$$N = AK_0H,$$

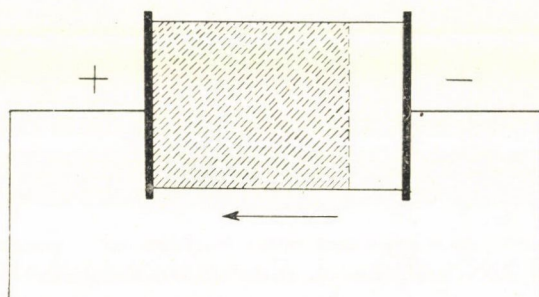
ahol  $K_0$  az abszorpciós együttható a sávmaximumban, a  $H$  pedig a félérték-szélesség. Az  $A$  konstans értéke NaCl-nél  $1,51 \cdot 10^{16}$ , KCl-nél  $1,36 \cdot 10^{16}$ , ha  $K_0$ -t  $\text{cm}^{-1}$ -ben,  $H$ -t pedig  $\text{eV}$ -ben mérjük. E számítások szerint az 1 ccm-ben lévő centrumszám gyengén festett kristály esetében  $10^{15}$ , erősen festett kristályban pedig  $10^{19}$  nagyságrendű is lehet.

b) *Kémiai eljárás.* Additíve vagy tűalakú katóddal festett kristályban alkalitöbblet van. Ha tehát a kristályt feloldjuk és meghatározzuk az oldat  $p_H$ -tartalmát, a fölös alkali-atomok száma, azaz az *F*-centrumok száma kiszámítható. Ezt az eljárást főleg erősen festett kristályok esetében használják.

c) *Elektromos eljárás.* Ha additíve vagy hegyes katóddal festett kristályt 400—600 C°-ra hevítünk és azután lemezalakú elektródokkal ellátva (6. ábra) elektromos térbe (1000—2000  $\text{volt/cm}$ ) helyezünk, az egyenletesen színezett kristály a katód felőli oldalról kiindulva elszíntelenedik. Az *F*-centrumok, mint



éles határvonallal rendelkező színes felhő, az anód felé vándorolnak. Ellenkező irányú térben a vándorlás ellenkező irányúvá válik. A vándorlás az  $F$ -centrumokról alkotott kép segítségével jól magyarázható. 400—600 C°-on az  $F$ -centrumok termikus energia folytán ionizálódnak, és a vezetési sávba került elektronok a tér irányában eltolódnak. A vándorló elektronok az útjukba eső halogén lyukakban valószínűleg újból fogságba esnek, majd ismét kiszabadulnak és így lépésenként  $F$ -centrumokat alkotva az anódhoz vándorolnak. Minthogy 400—600 C°-on a kristály elektrolitikusan jól vezet, az elektronok vándorlásával egyidőben pozitív ionok is vándorolnak ellenkező irányba és így az elektronok helyén pozitív töltések nem maradnak vissza. Megmérve a felhő vándorlása alatt átáramló töltésmennyiséget, meghatározhatjuk a kivándorolt elektronok számát.



6. ábra. Színcentrumok vándorlása magas hőmérsékleten, elektromos térben.  
A színes felhő az anód felé vándorol

d) *Sűrűség-mérés.* Additíve vagy hegyes katóddal festett kristályban a halogén ionok száma annnyival kevesebb az alkali ionokénál, amennyi az  $F$ -centrumok száma. Bizonyos számú halogén-ion helyett elektronok vannak a kristályban. Ennek következtében az erősen festett kristály sűrűségében mérhető csökkenés lép fel a szintelen kristályhoz képest.

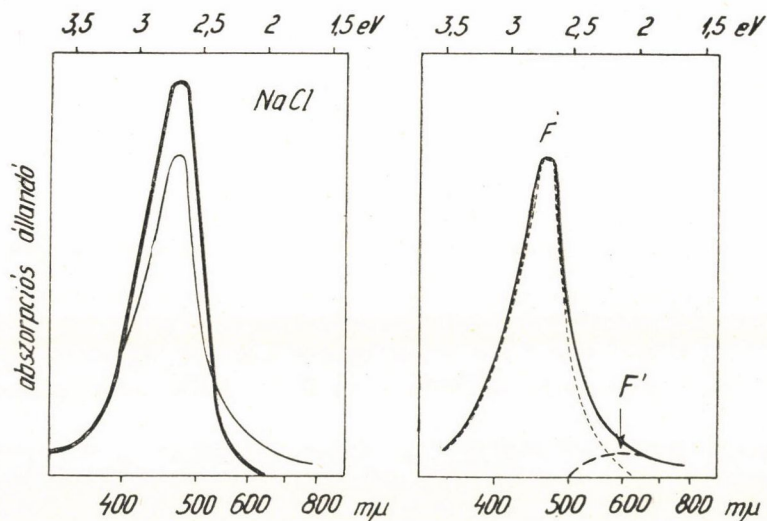
A felsorolt módokon elvégzett centrumszám-meghatározások megegyező eredményre vezetnek.

3.  *$F$ -centrumok tulajdonságai.* Az  $F$ -centrumokat tartalmazó kristályok tulajdonságai közül két alapvető tulajdonsággal foglalkozom, az egyik az  $F$ -centrumok átalakulása  $F'$ -centrumokká és ezek visszaalakulása, a másik pedig a fotovezetés.

Mi történik, ha a kristályt az  $F$ -sávban megvilágítjuk? Más megfogalmazásban, mi történik, ha  $F$ -centrum abszorbeál egy fénykvantumot?

a) Az abszorpció következtében az  $F$ -sáv a maximumban csökken, a hosszabb hullámhosszak felé eső oldalán pedig megemelkedik (7. ábra, vékonyabb vonallal kihúzott görbe). Ezt az abszorpciós görbét a 8. ábra szerint két görbéből összetettnek képzeljük és az abszorpció megváltozását úgy értelmezzük, hogy a megvilágítás következtében az  $F$ -centrumok egyrésze elpusz-

tul, ezért csökken az  $F$ -sáv, helyettük új centrumok keletkeznek, amelyek az  $F'$ -sávot hozzák létre. Ezeket az új centrumokat  $F'$ -centrumoknak nevezzük. Azt mondhatjuk, tehát, hogy az  $F$ -centrumoknak egy része  $F'$ -centrumokká alakul. Ha most a kristályt az  $F'$ -sávban világítjuk meg, akkor a tapasztalat szerint az  $F'$ -centrumok pusztulnak el, visszaalakulnak  $F$ -centrumokká és újból az eredeti  $F$ -sáv jelenik meg. Az  $F'$ -centrumok visszaalakulása  $F$ -centrumokká megvilágítás nélkül is végbemegy, ha a kristályt bizonyos ideig sötétben pihentetjük. Az  $F'$ -centrumok tehát kevésbé stabilak, mint az  $F$ -centrumok,



7. ábra. Az abszorpció megváltozása az  $F$ -sávban való megvilágítás hatására.

A megváltozott abszorpciósi görbe vékonyabb vonallal jelölve.

Ugyanez a görbe szerepel a 8. ábrában folyamatos vonallal kihúzva

8. ábra. A megváltozott abszorpciósi görbe a szaggatott vonalakkal kihúzott két görbe összegeként fogható fel

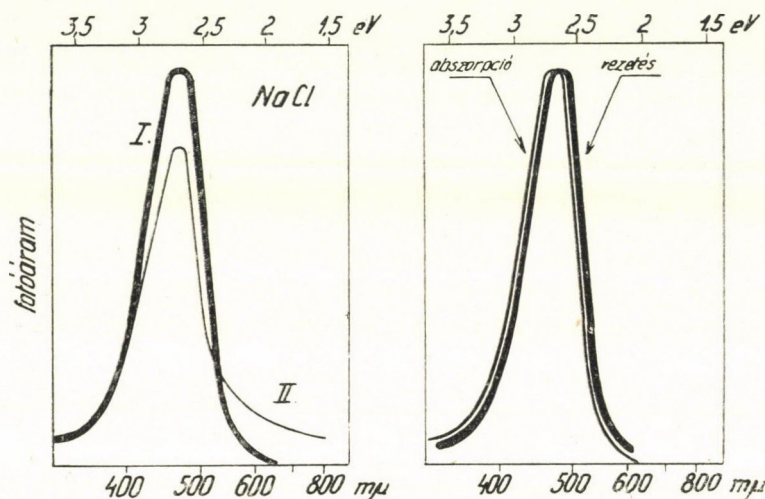
amelyek mint láttuk, csak magasabb hőmérsékleten esnek szét disszociáció folytán. A visszaalakulás sebessége függ a hőmérséklettől, NaCl kristálynál pl. szobahőmérsékleten 1—2 óra alatt következik be, de 100 C° körül már percek alatt. KCl-ban már szobahőmérsékleten is percek alatt visszaáll az eredeti állapot. Két jelenségről van tehát szó, amiket  $F \rightarrow F'$ , illetőleg  $F' \rightarrow F$  átalakulásoknak fogunk nevezni.

Az  $F \rightarrow F'$  és  $F' \rightarrow F$  átmeneteket egyszerűen értelmezzük. Feltételezzük ugyanis, hogy az abszorpció következtében az  $F$ -centrum ionizálódik, azaz elektronja a vezetési sávba emelkedik és bizonyos hosszúságú út megtétele után újból fogságba esik.\*

\* Fentebb az  $F$ -centrumok vándorlásánál láttuk, hogy az ionizáció termikus energia hatására következett be, itt most szobahőmérsékleten, abszorpció hatására létrejött ionizációról van szó.



Ha a fogságba ejtő hely egy elhagyott  $F$ -centrum, azaz egy halogén-hiányosság, akkor nem történik más, mint, hogy az egyik helyen megszűnik egy  $F$ -centrum és helyette új keletkezik egy másik helyen. Ha azonban halogén-hiányosság helyett valami más helyen esik fogságba a kóborló elektron, akkor új centrumfajta keletkezik. A tapasztalat szerint fel kell tételeznünk, hogy egy meglévő  $F$ -centrum is foglyul ejthet elektront. Ezen a helyen a halogén-hiányosságban két elektron lesz, amelyek egy-egy szomszédos alkali-ionnal alkali „molekulát” képeznek. Ilyen hely az, amit  $F'$ -centrumnak nevezünk.



9. ábra. A fotoáram spektrális eloszlása NaCl esetében.  
I. kezdeti eloszlás

II. spektrális eloszlás az  $F$ -sávban való előzetes megvilágítás után

10. ábra. Fényelnyelés (vékony vonal) és fotovezetés (vastag vonal) spektrális eloszlása NaCl esetében. A görbéket a maximumban fedésbe hoztuk

Míg az  $F$ -centrumot tehát alkali-atommal azonosítottuk, addig az  $F'$ -centrum esetében alkali „molekuláról” beszélhetünk.

Az  $F' \rightarrow F$  átmenetnél fordított folyamat játszódik le. Az  $F'$ -centrum vagy abszorpció következtében vagy termikus úton (már szobahőmérsékleten!) disszociál, leadván egy elektront. A vezetési sávba jutott elektron azután addig vándorol, útközben esetleg átmenetileg  $F'$ -centrumokat alakítva ki, amíg egy elhagyott halogén-lyukra nem talál, ahol stabilabb kötésben  $F$ -centrumot alakít ki. Az  $F'$ -centrum az elektronleadás után szintén  $F$ -centrummá válik. Az  $F'$ -centrumok felépülésénél, tehát egy  $F'$ -centrum kialakulásakor két  $F$ -centrum pusztul el, a visszaalakuláskor pedig egy  $F'$ -centrum helyébe két  $F$ -centrum lép. Ez a kép ezideig a tapasztalattal jó megegyezésben van.

b) Az elképzelést alátámasztja többek között az a tapasztalat, hogy mindkét folyamat fotovezetéssel jár együtt, ha az abszorpció elektromos térben tör-

ténik. A fotoáram spektrális eloszlását a 9. ábra mutatja, a fotoáramot egységnyi beeső energiára számolva. Az I. görbe olyan kristályhoz tartozik, amelyben csak  $F$ -centrumok vannak (a mérést oly gyenge fénnel végezzük, hogy a mérőfény az  $F$ -centrumok számában nem hoz létre lényeges változást). A II. görbe pedig olyan kristályhoz tartozik, amelyben  $F'$ -centrumok is vannak, tehát olyan kristályhoz, amelyet mérés előtt perceként át az  $F$ -sávban erős fénnel megvilágítunk. Az a tény, hogy az  $F'$ -sávban is észlelünk fotovezetést, mutatja, hogy az  $F'-F$  átmenet is fotovezetéssel jár együtt. A 10. ábrában a fotovezetés spektrális eloszlásán kívül feltüntettem az abszorpciós görbét is összehasonlításképpen. Látjuk, hogy a vezetéshez tartozó görbe kissé eltolódott a hosszabb hullámhosszak felé az abszorpciós görbéhez képest. Ez azt jelenti, hogy ugyanakkora abszorbeált energiához nagyobb fotoáram tartozik a hosszabb hullámhosszaknál, mint a rövidebbeknél. Gyulai mérései szerint egyenlő abszorbeált energiák esetében a fotoáram a hullámhosszal arányosan változik. Ez pedig azt mutatja, hogy kvantumszerű elektronleválásról van szó.

A fotoáramra a fentiek alapján elemi számítás útján a következő összefüggést írhatjuk fel:

$$i = \frac{I}{h\nu} \eta e \frac{w}{d} E,$$

ahol

$i$  = fotoáram

$I$  = 1 sec alatt elnyelt fényenergia

$h\nu$  = abszorbeált fénykvantum

$e$  = elemi töltés

$d$  = az elektródok egymástól való távolsága

$E$  = térerősség

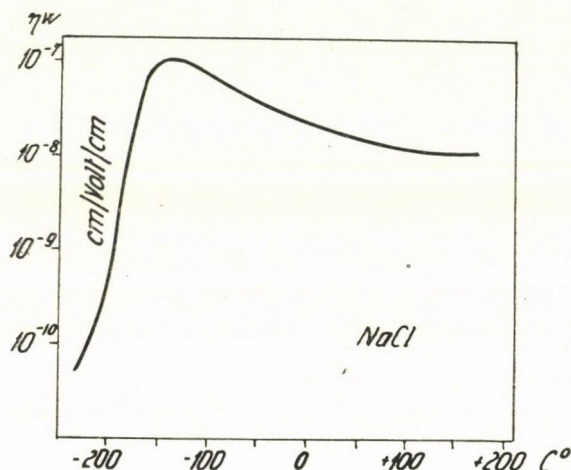
$\eta$  = kvantumhatásfok, azaz a kiváltott elektronok száma osztva az abszorbeált kvantumok számával.

$w$  = a vezetési sávba került elektron eltolódási útja egységnyi térerősség esetében.

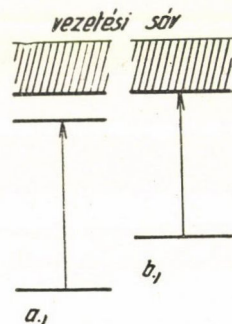
Az összefüggés alapján  $\eta \cdot w$  szorzat kiszámítható és értéke a mérések szerint a centrumkoncentrációtól és a hőmérséklettől függ. Ezt a függést eddig még inkább csak  $F-F'$  átmenet esetében vizsgálták, ezért ezen vizsgálatok eredményeit ismertetem csupán. A szorzat az  $F$ -centrumok koncentrációjának növelésével csökken, ami azzal magyarázható, hogy nagyobb centrumkoncentráció esetében az elektronok rövidebb út megtétele után már fogságba eshetnek valamelyik  $F$ -centrumban, ahol azután  $F'$ -centrumot alakítanak ki. Nagy centrumkoncentráció esetén tehát a  $w$  csökken és ezért csökken az  $\eta w$  szorzat is. — Az  $\eta w$  szorzat hőmérséklettől való függését a 11. ábra mutatja. Látjuk, hogy kb.  $-150^\circ \text{C}$  hőmérséklettől fölfelé a szorzat kissé csökken, az említett hőmérséklettől lefelé pedig rohamos csökkenést tapasztalunk. Az utóbbi erős csökkenés egyéb mérések szerint valószínűleg a kvantumhatásfok



nagymértékű csökkenésével van kapcsolatban, ami azt jelenti, hogy az alacsony hőmérsékletű tartományban nem mindegyik fénykvantum vált ki elektront. A hajlat fölötti hőmérsékleteken egyéb mérések szerint a kvantumhatásfok állandó, éspedig 1, ami azt jelenti, hogy minden abszorbeált kvantum kivált elektront. A görbének gyenge esése ebben a hőmérsékleti tartományban valószínűleg az eltolódási utak rövidülésével van tehát kapcsolatban, amely viselkedés hasonló a fémek viselkedéséhez, ahol a hőmérséklet emelkedésével a vezetőképesség szintén hasonló mértékben csökken.



11. ábra. Quantumhatásfok ( $\eta$ )  $\times$  fotoelektron eltolódási útja ( $w$ , egységyi térerősségre számolva) függése a hőmérséklettől NaCl esetében



12. ábra.  $F$ -centrum (a) és  $F'$ -centrum (b) energianívói

Abból a tényből, hogy alacsony hőmérsékleteken nem minden abszorpció vezet elektronkiváltáshoz, arra kell következtetnünk, hogy az  $F$ -centrumok abszorpciója a 12/a. ábra szerint megy végbe. Itt pedig arról van szó, hogy az abszorbeált energia az  $F$ -centrum elektronját egy energianívóról előbb egy másik energianívóra, nem pedig a vezetési sávba emeli. Alacsony hőmérsékleteken nagyobbára ez a gerjesztéshez hasonló jelenség következik be, és csak magasabb hőmérsékleteken jut az elektron a vezetési sávba, amikor már a rács termikus energiája elegendő ahhoz, hogy az elektront a felső nívóról a nem túl messze lévő vezetési sávba segítse. — Az  $F'$ -centrumokkal kapcsolatban eddig még semmi okunk nincs arra, hogy az abszorpciót a fenti módon képzeljük el, ezért  $F'$ -centrum esetében a 12/b. ábra szerinti közvetlen elektronátmenetekre gondolunk.

4.  $V$ -sávok. Eddig az  $F$ -sávval foglalkoztam, legelőször ez hívta magára a figyelmet, és tulajdonságairól számos dolgozat jelent meg. Ma már tudjuk azonban, hogy az  $F$ -centrum egy részprobléma és a színezésnél lejátszódó folyamatoknak az  $F$ -centrum egyik produktuma csupán. Ha visszagondolunk



a fentebb vázolt folyamatokra, amelyek színezéskor az  $F$ -centrumokat kialakítják, ezt természetesnek is tartjuk.

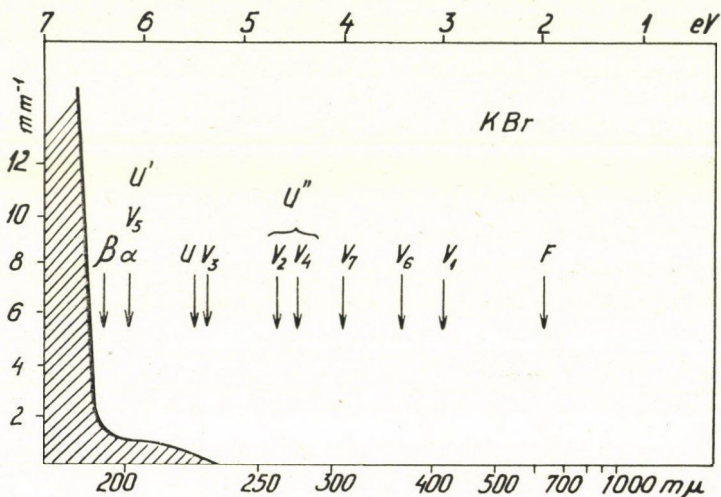
Gondoljunk a röntgensugárral történő színezésnél lejátszódó folyamatokra. Azt mondtuk, hogy röntgensugár hatására valahol a kristályban szabaddá válik egy elektron és ez esik fogságba ezután halogén-hiányosságban, kialakítván egy  $F$ -centrumot. Mi történik azon a helyen, ahonnan kivált az elektron? A legegyszerűbb esetről beszéljünk, amikor pl. egy klór-ionból hiányzik egy elektron. Itt klór-atom, mondhatnánk negatív klórion  $+$  defektelektron jön létre a kristályban normális rácshelyen. Ha elképzelésünk helyes és ilyen helyek vannak a kristályban, akkor ennek az abszorpcióban is mutatkoznia kell, azaz az  $F$ -sávon kívül más sávnak is, mondjuk  $V_1$ -sávnak is kell lennie. Ez a sáv pedig olyan, amely csak alacsony hőmérsékleten életképes. A klór-atom normális rácskörnyezetben ugyanis magasabb hőmérsékleten, ahol számottevő ionmozgás van a kristályban, nem fog hosszú ideig élni. Ilyen helyen ugyanis negatív töltéshiány van. Ez a hely ionmozgás folytán valószínűleg társulni fog egy olyan hellyel, ahol pozitív töltés hiányzik, tehát pl. egy alkali-hiányossággal. Ezt kívánja ugyanis az elektrosztatikai egyensúly. Klór-atom alkali-hiányossággal párosulva már stabilabb képződmény lesz, mint az előző. Ez a képződmény hasonló az  $F$ -centrumokhoz.  $F$ -centrum esetében halogén-üregben fogságba esett elektronnal beszéltünk, most pedig azt mondhatjuk, hogy alkali-üregben fogságba esett defektelektronnal van szó. Az  $F$ -centrumok jelenléte bizonyos helyeken alkali-többletet, az utóbb említett centrumok jelenléte pedig halogén-többletet jelent a kristályban. Röntgensugárral való színezés esetében természetesen mindkét helynek egyenlő számban kell kialakulnia. Az utóbb említett képződmény ismét más sávot hoz létre, mint a  $V_1$ -sáv, mondjuk  $V_2$ -sávot. Ma már tudjuk, hogy valóban léteznek abszorpciós sávok, amelyeket az említett produktumoknak tulajdoníthatunk. Az  $F$ -sáv ultraviola oldalán 8 sávot ismerünk, az ú. n.  $V$ -sávokat, amelyek röntgensugárral színezett kristályokban megfigyelhetők. Sajnos, e sávokat létrehozó centrumok milyenségét pontosan még nem ismerjük, csupán gyanítjuk. A 13. ábra KBr-ban létrehozott  $V$ -sávok helyzetét mutatja. (A vonalkázott tartomány a saját abszorpció). A nyílak a sávmaximumokat jelzik. A  $V_1$ -nyíl helyén van az a sáv, amelyet az előbb említett  $V_1$ -sávval azonosíthatunk;  $V_2$ -nyíl helyén a  $V_2$ -sáv van. A  $V_3$ ,  $V_4$ ,  $V_6$ ,  $V_7$ -sávokról jelenleg még nem sokat mondhatunk, legfeljebb annyit, hogy valószínűleg defektelektronokkal vannak kapcsolatban, miként a  $V_1$  és  $V_2$ -sávok. Azt is mondhatjuk, hogy halogén-atomokkal, esetleg halogén-molekulákkal vannak kapcsolatban az említett sávok annál is inkább, mert akkor is megjelennek, ha a kristályt halogén atmoszférában izzítjuk.

A halogén atmoszférában való hevítésnél lejátszódó folyamat hasonló módon képzelhető el, mint az additív színezésnél végbemenő folyamat. A halogén-gőz a felületi alkali-ionokkal kémiai reakcióba lép és alkali-halogén molekulák jönnek létre. A reakcióhoz szükség van elektronokra, amelyeket a rács



halogén-ionjai szolgáltatnak. Ily módon jönnek létre a rácsban a defektelektronok, amelyeknek az említett centrumok kialakulásában jelentőséget tulajdonítunk.

Külön szeretnék beszélni a  $\beta$  és  $\alpha$ -sávokról (utóbbit  $V_5$ -sávnak is szokták nevezni). A  $\beta$ -sávot valószínűleg az  $F$ -centrumok jelenléte által deformált kristályrács hozza létre. Az  $F$ -centrum környezetében lévő kristályrács ugyanis kissé más, mint a normális rácskörnyezet; a  $\beta$ -sávot tehát az  $F$ -centrumok környezete produkálja. Az  $\alpha$ -sávot pedig valószínűleg halogén-hiányosságok környezete hozza létre, amely környezet nyilván másképpen abszorbeál, mintha



13. ábra. Az  $F$ -sáv rövidhullámú oldalán fellépő sávok helyzete KBr-ban.

A balszálon (vonalkázott tartomány) az ultraibolyába eső „saját” abszorpció látható

a hiányosság be lenne töltve halogén-ionnal. Bonyolult viszonyokról van tehát szó, és a helyzetet bonyolítja az a körülmény, hogy nemcsak az új centrumok hoznak létre új sávokat, hanem az új centrumok környezete is újabb sávokat produkál.

A 13. ábrába az új. n.  $U$ -sáv helyét is bejelöltem, amely a legalaposabban vizsgált abszorpciós sávok egyike. E sáv létrehozói, az  $U$ -centrumok, jelenlegi felfogás szerint olyan helyek, amelyeknél halogén-hiányosságban negatív hidrogén-ion van fogságban. Ilyen centrumok létrejönnek, ha pl. a kristályt hidrogén-atmoszférában izzítjuk. Az  $U$ -sávban való megvilágítás az  $U$ -centrumokat elpusztítja és helyettük  $F$ -centrumok alakulnak ki. Ha viszont a fellépülő  $F$ -sávban abszorbeáltatunk, akkor az  $F$ -centrumok visszaalakulnak  $U$ -centrumokká. Ezen átalakulásoknál valószínűleg arról van szó, hogy a hidrogén-ion elektronja egy szomszédos alkali-ionhoz tolódik és azzal  $F$ -centrumot alkot, illetőleg a visszaalakulásnál az elektron az alkali-ion környezetéből a hidrogénhez jut vissza. Az eltolódási utak kicsinysége miatt az átala-



kulásoknál mérhető fotoáram nem lép fel. Az  $U-F$  átalakulás közben az  $U$ -sáv csökkenésével nemcsak az  $F$ -sáv (és  $\beta$ -sáv!) felépülése jár együtt, hanem az  $\alpha$ -sáv is, ami azután a visszaalakulásnál az  $F$ -sávval (és  $\beta$ -sávval!) együtt leépül. Az  $\alpha$ -sávot valószínűleg a hidrogén-atomnak szállást adó halogén-üreg környezete hozza létre, amely környezet hasonló deformációt szenved, akár teljesen üres halogén-üregről van szó, akár olyanról, amelyben viszonylag kicsiny hidrogén-atom van jelen. Minthogy az  $\alpha$ -sáv az  $U$ -centrumokkal kapcsolatban végzett vizsgálatoknál is fellép, többhelyütt az irodalomban  $U'$ -vel is jelölik. Az  $U$ -sáv vizsgálatánál eddig még nem teljesen tisztázott körülmények között a  $V_2$  és  $V_4$ -sávok kialakulását is észlelték, amelyeket éppen ezért helyenként  $U''$ -vel is jelöltek.

Egyszerűbbek a viszonyok az ultraviola tartományban additive festett kristály esetében. Ott hiányoznak mindazok a centrumok, amelyeket defekt-elektronokkal hoztunk kapcsolatba. Ez a festés természetéből következik. Hiányoznak tehát a  $V_1, V_2, V_3, V_4, V_6, V_7$ -centrumok. Megvan azonban a  $\beta$ -sáv, amelyről azt mondtuk, hogy az  $F$ -centrum által deformált kristályráccsal van kapcsolatban, és mutatkozik az  $\alpha$ -sáv is, ha valamilyen módon halogén-hiányosságok jönnek létre a kristályban. Feltűnik pl. az  $\alpha$ -sáv akkor, ha  $F$ -centrumokat  $F'$ -centrumokba viszünk át. Ilyenkor ugyanis az elektron-kiváltás helyén halogén-hiányosság marad vissza.

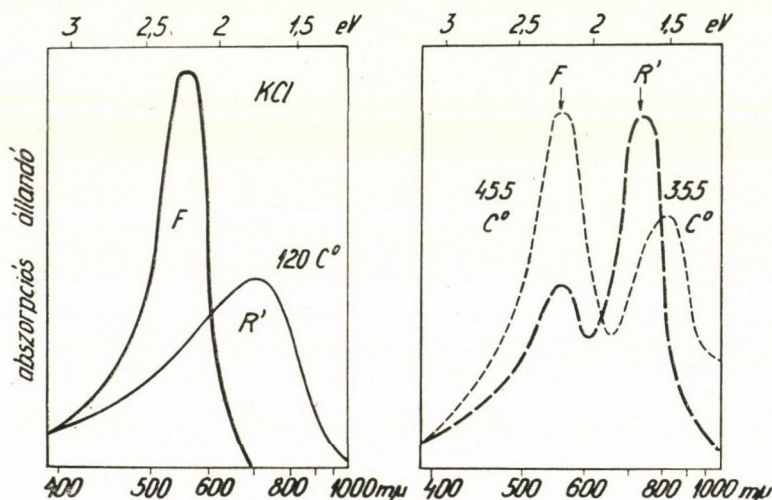
5. *F-centrumok aggregátumai.* Utóbb az  $F$ -sáv rövidhullámú oldalán jelentkező ú. n.  $V$ -sávokkal foglalkoztam. Több sávot ismerünk azonban az  $F$ -sáv hosszúhullámú oldalán is. Ilyen sáv volt már az előzőekben az  $F'$ -sáv, amely az  $F$ -centrumok megvilágítás hatására létrejött átalakulásának volt a következménye. Átalakulhatnak azonban az  $F$ -centrumok más centrumokká is. Utóbbiaknak a kialakulása azzal van kapcsolatban, hogy az  $F$ -centrumokat tartalmazó kristály szobahőmérsékleten nincs termodinamikai egyensúlyban és benne változások mennek végbe, a kristály termodinamikai egyensúly felé tart.

Miért nincs termodinamikai egyensúlyban szobahőmérsékleten az  $F$ -centrumokat tartalmazó kristály? Gondoljunk az additív színezésnél követett eljárásra. A kristályt olvadáspontja alatt  $50-100^\circ\text{C}$ -al alkaligőzők jelenlétében hevítettük néhány órán át, majd hirtelen lehűtöttük szobahőmérsékletre. A magasabb hőmérsékleten a kristály és az alkaligőz között egyensúlyi állapot alakult ki, amelyben létrejöttek az  $F$ -centrumok. Hirtelen lehűtésnél a magas hőmérsékletre tartozó egyensúlyi állapotot rögzítettük és az  $F$ -centrumokat, amelyek magas hőmérsékleten termodinamikai egyensúlyban voltak a kristállyal, mintegy befagyasztottuk. A tapasztalat szerint az ilyen kristályban hetek, hónapok, évek alatt az  $F$ -sáv hosszúhullámú oldalán, az  $F$ -sáv rovására újabb sávok jelennek meg. Lassú folyamat ez, amelyről még keveset tudunk.

Többet mondhatunk azonban talán magasabb hőmérsékletre, pl. KCl esetében  $100^\circ\text{C}$  fölötti hőmérsékletre tartozó egyensúlyi állapotokról. Induljunk ki olyan KCl kristályból, amelyet olvadáspontja alatt kb.  $100^\circ\text{C}$ -al addi-



tíve színeztünk és a hirtelen lehűtés következtében csak  $F$ -centrumok vannak benne. Ha ezt a kristályt  $100\text{--}120\text{ C}^\circ$ -on tartjuk sötétben, kb. 40 órán át, akkor a 14. ábrán felrajzolt abszorpciós görbét nyerjük. Az  $F$ -sáv teljes mértékben egy másik sávba, az  $R'$ -nek nevezett sávba megy át. Magasabb hőmérsékleten, pl. kb.  $300\text{ C}^\circ$ -on az  $F\text{--}R'$  átalakulás hamarabb, kb. 15 perc alatt már teljes mértékben végbemegy és hosszabb ideig tartó melegítés már nem hoz létre változást.  $100\text{--}300\text{ C}^\circ$  tartományban az  $R'$ -sáv jellemzi az egyensúlyi állapotot és teljesen hiányzik az  $F$ -sáv.  $300\text{--}500\text{ C}^\circ$  tartományban az egyensúlyi állapotra jellemző görbéket, amelyeknek kialakulásához néhány



14. ábra. Additive festett KCl abszorpciója  $120\text{ C}^\circ$ -on történő hőkezelés után ( $R'$  görbe). Baloldalon az eredeti  $F$ -sáv látható.

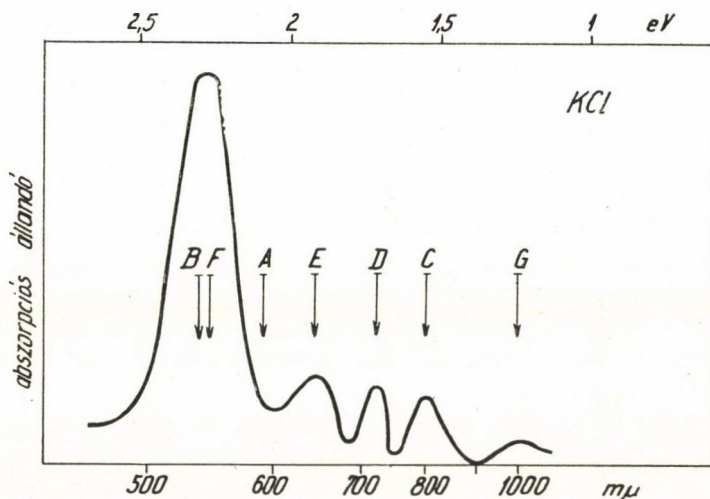
Az abszorpció mérése gyors lehűtés után szobahőmérsékleten történt

15. ábra. Additive festett KCl abszorpciója  $355\text{ C}^\circ$ -on és  $455\text{ C}^\circ$ -on történő hőkezelés után. Előbbinél az  $R'$ -vel, utóbbinál az  $F$ -fel jelölt emelkedés dominál.

Az abszorpciómérés a hirtelen szobahőmérsékletre hűtött kristályon történt

perces melegítés már elegendő, a 15. ábra mutatja. Itt már megjelenik az  $F$ -sáv, az  $R'$ -sáv pedig hosszabb hullámoknál jelentkezik. A hőmérséklet emelésével egyre uralkodóbbá válik az  $F$ -sáv az  $R'$ -höz képest, és az  $R'$  tovább tolódik a hosszúhullámok felé.  $500\text{ C}^\circ$  fölött már eltölpül az  $R'$ -sáv az  $F$ -hez képest és kb.  $100\text{ C}^\circ$ -al az olvadáspont alatt már csak  $F$ -sávot észlelünk. Eddig, mint említettem, csak az  $F$ -sávot vizsgáltuk, és pedig úgy, hogy a magas hőmérsékletű állapotot hirtelen lehűtéssel rögzítettük, és a vizsgálatokat szobahőmérsékleten vagy alacsonyabb hőmérsékleten végeztük. A más hőmérsékletre tartozó állapotot is vizsgálhatjuk hasonló módon. Ha pl.  $400\text{ C}^\circ$ -ról hűtjük le hirtelen a kristályt, akkor a  $400\text{ C}^\circ$ -hoz tartozó állapotot rögzítjük. Ilyen vizsgálatot eddig keveset végeztek és így az  $R'$ -sáv létrehozóiról, amiket

$R'$ -centrumoknak nevezhetünk, még keveset tudunk. Valószínűnek látszik, hogy az  $R'$ -centrumok tulajdonképpen az  $F$ -centrumok aggregátumai. Több  $F$ -centrum társulására kell gondolni, amely társulásban hiányosság-csoportosulások is résztvesznek. Nem egységes centrumok ezek, miként az  $F$ , vagy  $F'$ -centrumok, hanem valószínűleg keverékcentrumok, amelyekben a legkülönbözőbb csoportosulások jelen vannak. Ezek a centrumok a bennük lévő  $F$ -centrumok számában és a velük társult hiányosságok, lyukak számában különböznek egymástól. Annyi biztosnak látszik, hogy minden hőmérsékleten egy bizonyos termodinamikai egyensúly áll fenn a különböző csoportosulások, azaz az  $R'$ -centrumok és az



16. ábra. Az  $F$ -sávban történő megvilágítás hatására létrejött sávok additive festett KCl-ban. A megvilágítás szobahőmérsékleten, az abszorpciómérés —  $170^\circ\text{C}$ -on történt

$F$ -centrumok között. Alacsonyabb hőmérsékleten, KCl-ben  $100$ – $300^\circ\text{C}$  tartományban az egyensúly az  $R'$ , magasabb hőmérsékleten az  $F$ -centrumok felé tolódik el. Az egész folyamat a lyuk-, illetőleg ionvándorlással van kapcsolatban és az egyensúlyi állapot csak magasabb hőmérsékleten következik be rövid idő (néhány perc) alatt, amikor már mérhető ionmozgás is van a kristályban. — A tapasztalat szerint az  $F$ – $R'$  átmenetet a melegítéssel egyidőben történő erős megvilágítás gyorsítja. Ez az eddigiek alapján nem meglepő, mert hiszen feltételezhető, hogy a megvilágítás következtében elnyelt energia, esetleg vezetési sávba került elektronok vándorlása a csoportosulásokat elősegíti.

Tisztázatlanabbak a viszonyok, mint már említettem,  $100^\circ\text{C}$  alatt, pl. szobahőmérsékleten. Itt, kicsiny lévén az ionvándorlás, csak hosszabb idő után várható lényeges változás a kristályban. A labilis helyzetet megbolygathatjuk azonban erős fénnel való megvilágítással, annyira, hogy bizonyos változások már percek alatt létrejönnek és jól megfigyelhetőkké válnak. Az ily módon létrehozott új sávokat *Petroff* az  $ABC$  betűivel jelölte (16. ábra). Víz-



gálatai szerint előbb az  $A$ -sáv, majd az  $F$ -sávtól kevéssel a rövidebb hullámok felé eső  $B$ -sáv alakult ki,\* ezután a jól megfigyelhető  $C$ -sáv, (amit a szovjet irodalom  $O$ -val, az angolszász irodalom  $M$ -el jelöl) majd a  $D$ -,  $E$ -sávok és végül a  $G$ -sáv. A  $D$ - és  $E$ -sávokat az angolszász irodalom  $R_1$  és  $R_2$ -sávoknak nevezi. Mindegyik sáv az  $F$ -sáv rovására alakul ki, az  $F$ -sáv teljes átalakulása azonban úgy látszik nem következik be. Ma még nem tudjuk megmondani, hogy melyik sávot milyen centrumfajta okozza, de valószínű, hogy olyan centrumokról van szó, amelyeket „átmeneti centrumok”-nak tekinthetünk az  $R'$ -centrumok felé. Ezek a centrumok valószínűleg az  $F$ -centrumoknak és a kristályban lévő hiányosságoknak egyszerűbb csoportosulásai, mint az  $R'$ -centrumok. A legegyszerűbb képződményekre lehet gondolni: pl. 1  $F$ -centrum + 1 párhiányosság, vagy 1  $F$ -centrum + 2 párhiányosság, esetleg több hiányosság, 2  $F$ -centrum + 1 vagy több párhiányosság, átmenetileg esetleg páratlan-számú hiányosságok is előfordulhatnak. Elképzelhető, hogy lényeges szerepet játszik az egyes sávok létrehozásában az is, hogy hogyan helyezkedik el az  $F$ -centrum (illetőleg  $F$ -centrumok) a hiányosságokhoz képest és hogy hogyan helyezkednek el a hiányosságok egymáshoz képest (pl. láncszerű, félkör alakú vagy tömöttebb elrendeződés). Ezeket a centrumokat úgy tekinthetjük, mint a magasabb aggregátumoknak, az  $R'$ -centrumoknak előhírnökeit vagy szálláscsinálóit.

Sok nyitott kérdés van még tehát, bárhová is tekintünk a színcentrum-problémával kapcsolatban. E problémakör kis ablak csupán, amelyen keresztül gazdag raktárba, az anyag belsejében lejátszódó finom folyamatokba tekinthetünk bele és minél mélyebbre hatolunk, annál értékesíthetőbbek lehetnek számunkra a raktár kincsei. A részprobléma mögött már most is láthatjuk a szélesebb perspektívát, amely újabb adatokat szolgáltat az anyag szerkezetéhez. Ismernünk kell finomságaiban a hibahelyek természetét, az ionvándorlást és így közelíthetjük meg fokozatosan a gyakorlati élet számára egyre fontosabbá váló félvezetők, fotokémiai folyamatok, stb. tisztázását. Minden reményünk megvan azonban arra is, hogy talán olyan folyamatokba is betekintést szerezhethetünk, amelyek atomoknak atomcsoportokká való társulására vezetnek és megfigyelhetjük atomokból esetleg kolloid részecskéket, a kompakt anyagnak a felépülését.

\* Az  $A$ -sáv jelenlétére az  $F$ -sáv hosszuhullámú lejtőjének felemelkedéséből lehet következtetni. A  $B$ -sávot nem sikerült az  $F$ -sávtól szétválasztani, egy ilyen sáv jelenlétét azonban mégis fel kell tételeznünk, mert a tapasztalat szerint az  $F$ -sáv maximuma az új sávok kialakulása közben kissé a rövidhullámhosszak felé tolódik. Szükségünk van a  $B$ -sáv feltételezésére azért is, mert Petroff vizsgálatai szerint az  $F$  és  $A$ -sávból közvetlenül nem alakulhat ki a soron következő  $C$ -sáv, léteznie kell egy közbeeső sávnak. Feltételezzük, hogy éppen ez a  $B$ -sáv az, amely az  $F$ -sáv maximumát a rövidebb hullámok felé eltolja.



# AZ ATOMMAG HÉJSZERKEZETE\*

SZAMOSI GÉZA

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest  
Kozmikus sugárzási osztály

Elméleti atommagfizikáról a neutron felfedezése, tehát 1932 óta beszélhetünk. Ugyanez évben állította fel u. i. *Ivanenko* azt a hipotézist, hogy az atommagban protonok és neutronok vannak. A magfizika ezen stádiuma óta folynak vizsgálatok arra nézve, hogy van-e az atommagnak héjszerkezete, és ha igen, milyen. Mindjárt kezdetben, elsősorban *Gapon* és *Elsasser* munkássága nyomán, egy sor tapasztalati tény gyűlt össze, melyek az atommag héjszerkezetére utaltak. Később *Wefelmayer* és *Schmidt* érték el bizonyos eredményeket héjmodellek alkalmazásával. Mindazonáltal ezek az elképzelések inkább érdekességgént, mintsem általánosan elfogadott elméletként lettek kezelve. Ennek oka a *Bohr* és mások által felállított statisztikus elmélet, a cseppmodell és ezzel analóg modellek nagy sikereiben keresendő. A magfizikának a negyvenes években történt nagy fejlődése azonban igen sok olyan tényt hozott felszínre, melyek ismét aktuálissá tették a kérdést: vannak-e az atommagban zártnak nevezhető héjak és ha igen, magyarázható-e ezek létrejötte ugyanúgy a Pauli elv segítségével, mint az elektronfizikában.

Mint látni fogjuk, a válasz mindkét kérdésre igenlő. Ha alaposan megvizsgáljuk a ma ismert közel háromszáz stabil izotóp különböző tulajdonságait, arra a következtetésre jutunk, hogy bizonyos kitüntetett számú protont vagy neutront tartalmazó magok több szempontból különös stabilitást mutatnak.

Az atommag zárt héjai természetesen nem egyformán stabilak. Vannak olyan proton-, ill. neutronsámok, melyek fellépésekor az atommag egészen különös stabilitást mutat, de vannak olyanok is, ahol a stabilitás csak viszonylagos. Csak a tapasztalati tények kritikus vizsgálata mutathatja meg, hogy milyen nukleonszámoknál beszélhetünk az atommagban levő nukleonhéjak lezárttságáról.

A dolgozat első részében áttekintünk néhányat az e kérdésre vonatkozó tapasztalati tényekből,<sup>1</sup> a második részben pedig a kérdés elméletét fogjuk tárgyalni. (Az  $E$  kémiai jelű elem  $Z$  protonból és  $N$  neutronból álló magját a következőkben az  ${}^N_ZE^{N+Z}$  szimbólummal fogjuk jelölni.)

\* Érkezett 1953. okt. 1.

Ez a cikk a szerzőnek, a Die Naturwissenschaften című folyóiratban megjelent két, és az Acta Physicában megjelenés előtt álló egy dolgozatának kibővített összefoglalása.



## I. A tapasztalati tények áttekintése

### 1. A páros proton- és neutrons számok kitüntetettsége

Régóta ismeretesek a stabil izotópok eloszlására vonatkozó következő szabályok:

a) Páratlan rendszámú elemeknek két stabil izotópjuk van. Páros rendszámú elemeknél sokkal több stabil izotóp lehetséges, de ezek között a legkönnyebb és a legnehezebb mindig párosszámú neutronot tartalmaz.

b) Adott páratlan tömegszámmal legtöbbször egy stabilis elem fordulhat elő, nagyon ritka kivétel a stabil izobár.

c) Az olyan stabil elemek, ahol úgy  $Z$ , mint  $N$  páros, jóval gyakoribbak, mint az olyan elemek, ahol mind  $Z$ , mind  $N$  páratlan. Ilyen összesen négy van, ezek is a legkönnyebb magok között. ( ${}^1_1D^2$ ,  ${}^3_2L^6$ ,  ${}^5_5B^{10}$ ,  ${}^7_7N^{14}$ .) A következő kis táblázat mutatja a stabil izotópok eloszlását páros és páratlan  $Z$ , ill.  $N$  esetén.

1. táblázat

Neutrons szám		Protons szám	
		Páros	Páratlan
	Páros	162	52
	Páratlan	56	4

Ezek a szabályok arra mutatnak, hogy úgy a protonok, mint a neutronok, párosan „szeretnek élni” az atommagban. Mindezekből az is következik, hogy ha vannak különösen stabil nukleonszámok, akkor ezeket a páros számok között kell keresnünk.

Tapasztalat szerint a kitüntetett nukleonszámok a következők: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126.

### 2. A legkisebb kitüntetett nukleonszámok

A  ${}^4_2He$  elem magjának ( $\alpha$  rész) környezetéhez képest kiugróan nagy a kötési energiája. A stabil elemeket tekintve csupán, a viszonyokat a következő táblázat vázolja:

2. táblázat

$N$	$Z$	Elem	Kötési energia/nukleon (MeV)
1	1	H	1,09
2	2	He	7,05
3	3	Li	5,32
4	3	Li	5,59
5	4	Be	6,44
1	2	He	2,55

A két protonból és két neutronból álló  ${}^4_2\text{He}$  mag tehát környezetéhez képest különösen stabil. Illusztrálja ezt az is, hogy ha ebből a magból mesterségesen  ${}^5_2\text{He}$  magot állítunk elő, akkor ez  $\approx 10^{-20}$  sec nagyságrendű felezési idővel  ${}^4_2\text{He} + n$ -re bomlik szét.

A 8-as nukleonszám kitüntetettségére a  ${}^{16}_8\text{O}$  elem erős stabilitásából következtethetünk. A következő példa igen meggyőző lesz. Tekintsünk egy  ${}^{12}_6\text{C}$  és egy  ${}^{16}_8\text{O}$  magot, tegyük hozzá mindkettőhöz egy  $\alpha$  részt és vizsgáljuk a két reakció energiaviszonyait.

3. táblázat

Elem	Kötési energia (MeV)	Elem	Kötési energia (MeV)
${}^{12}_6\text{C}$	91,76	${}^{16}_8\text{O}$	127,16
${}^4_2\text{He}$	28,20	${}^4_2\text{He}$	28,20
	119,96		155,36
${}^{16}_8\text{O}$	127,16	${}^{20}_{10}\text{Ne}$	159,38
$\Delta E =$	7,20	$\Delta E =$	4,02

A két energia közötti nagy különbség ékesszólóan bizonyítja a 8 protont és 8 neutront tartalmazó mag nagy stabilitását. A periódusos rendszernek ezen a környéken hasonló példát nem lehet találni.

Viszonylagos stabilitást mutatnak a 14-es nukleonszámmal bíró magok. Példa erre a  ${}^{28}_{14}\text{Si}$  mag nagy stabilitása. A 14 nukleont tartalmazó héjjakat azonban eléggé meggyőző adatok híján nem szoktuk zárt héjnak tekinteni.

### 3. Kitüntetett számok a stabil magok tartományában

#### a) A stabil izotópok és izotónok száma

A viszonylag már nagy nukleonszámoknál a stabilitásra nem annyira a kötési energia a mérvadó, mint inkább a stabil izotópok és izotónok adatai. Ennek több oka van. Részint az, hogy a tömegdefektus mérése ebben a tartományban nem olyan pontos, mint a legkönnyebb magoknál. A növekedő Coulomb taszítás és a magerők telítettsége — melyeknek ezeknél a nukleonszámoknál már szerepe van — is arra készítetnek, hogy a kötési energia helyett inkább a stabil izotópok és izotónok számát és más adatait vizsgáljuk. A következő táblázatban 16—32 nukleonszámokra felírtuk a stabil izotónok számát. Jól látszik, hogy 20 és 28 neutrons számok mellett a stabil izotónok száma kiugróan nagy. A táblázatból jól látható a páros számok erős kitüntetettsége is.

4a táblázat

N	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32
Stabil izotónok száma	3	1	3	0	5	1	3	1	3	1	3	1	5	1	4	1	3



Hasonló a helyzet, ha a stabil izotópokat feltüntető táblázatot nézzük

4b táblázat

Z	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32
Stabil izotópok száma	4	2	3	3	6	1	5	1	4	1	4	1	5	2	5	2	5

A nehezebb magok felé folytathatjuk a táblázatot. Az 50-es szám környékén a viszonyok a stabil izotónokat illetően a következőképpen alakulnak.

5a táblázat

N	47	48	49	50	51	52	53	54
Stabil izotópok száma	1	4	1	6	1	4	1	3

Az analóg izotóp táblázat:

5b táblázat

Z	47	48	49	50	51	52	53	54
Stabil izotópok száma	2	7	2	10	2	8	1	9

A 82-es nukleonszám környékén — ha csak a stabil magokat tekintjük — elegendő az  $N$  értékeket vizsgálni, mert az ilyen nagy protonszámú magok már részben a radioaktív tartományba esnek. A stabil izotónok számát az  $N=82$  környékén a következő táblázat mutatja:

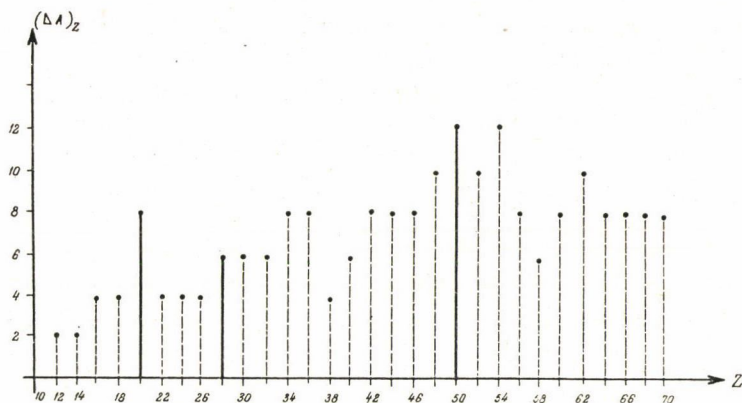
6. táblázat

N	78	79	80	81	82	83	84	85
Stabil izotópok száma	5	1	3	2	7	1	2	2

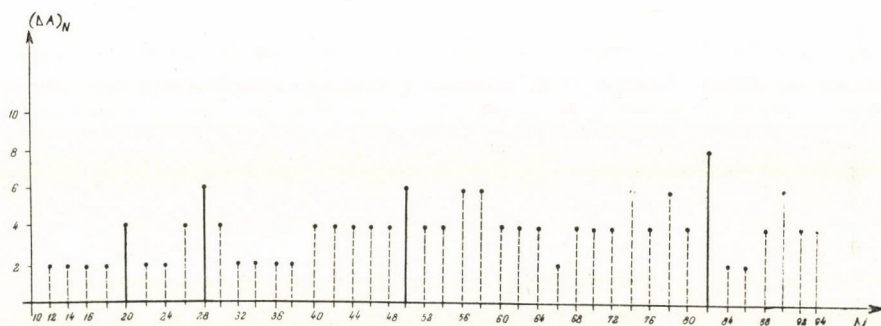
Mindezek a táblázatok egybehangzóan mutatják a fentebb említett nukleonszámok kitüntetettségét, azaz a kitüntetett nukleonszámot tartalmazó magok különösen nagy stabilitását.

b) A legkönnyebb és legnehezebb izotópok és izotónok tömegkülönbségei

A stabil izotónok és izotópok számainak összehasonlítása mellett érdemes megvizsgálni a különböző  $Z$  és  $N$  értékekhez tartozó legkönnyebb és legnehezebb izotópok és izotónok tömegkülönbségeit. Nyilvánvaló, hogy a nagyobb tömegkülönbség éppoly meggyőzően mutat a nagyobb stabilitásra, mint az előző összehasonlítások. A legkönnyebb és legnehezebb izotópok és izotónok tömegkülönbségét  $\Delta_z$ , ill.  $\Delta_N$ -nel fogjuk jelölni. A tömegkülönbség változásait a következő ábrák mutatják (az egyszerűség kedvéért most már csak a páros nukleonszámokat vizsgáljuk):



1. ábra. Legkönnyebb és legnehezebb izotópok tömegkülönbségei, páros Z-k esetén



2. ábra. Legkönnyebb és legnehezebb izotópok tömegkülönbségei páros N-k esetén

Az ábrák a kitüntetett számoknál levő nagy izotóp és izotón különbségeket szemléltetik.

### c) Izotópgyakoriság

Érdekes adalékot nyújt az izotópgyakoriság vizsgálata is. Különösen érdemes a viszonyokat az  $N=50$  és  $N=82$  értékek környékén megvizsgálni.

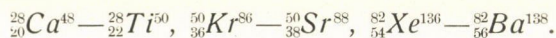
A nehezebb magoknál az izotópok gyakoriságának eloszlására vonatkozóan általános szabályokat állíthatunk fel. Így fontos szabály az, hogy általában a középső izotópok a leggyakoribbak és a gyakoriság erősen csökken úgy a könnyebb, mint a nehezebb izotópok felé haladva. Általában a legkönnyebb és a legnehezebb izotópok gyakorisága soha sincs 5%-on felül. A kitüntetett számoknál azonban markáns kivételeket találunk. Pl.  $Zr$  legkönnyebb izotópjának  $^{90}_{40}Zr$  gyakorisága 58%. Hasonló a helyzet a  $Mo$  legkönnyebb izotópjánál  $^{92}_{42}Mo$ -nál, melynek gyakorisága 21%. Ugyanez a helyzet a legnehezebb izotópok esetében is. A  $Kr$  legnehezebb izotópjá  $^{86}_{36}Kr$ , 20%, a  $Sr$  legnehezebb  $^{88}_{38}Sr$  izotópjá 89%-os gyakorisággal élesen kiugrik az általános szabály alól.



Hasonló a helyzet az  $N=82$  kitüntetett neutronszámmal bíró magoknál. A  ${}^{82}_{60}\text{Nd}^{142}$  a legkönnyebb  $\text{Nd}$  izotóp, egyben a leggyakoribb és még érdeke-  
sebb a helyzet az  $\text{Sm}$  elemnél, ahol a páros-páros típusú  ${}^{84}_{62}\text{Sm}^{146}$  (lefelé haladva  
a neutronszámmoknál) már egyáltalában nem létezik, a nála is könnyebb  ${}^{82}_{62}\text{Sm}^{144}$   
ismét létezik és 4%-os gyakoriságot mutat. Az utóbbi két ( $\text{Nd}$  és  $\text{Sm}$ ) izotóp  
mutat egyedül kivételt az alól a szabály alól, hogy a  $\text{Zn}$ -től felfelé a leg-  
könnyebb izotópok 1%-nál nem gyakoribbak.

d) Szomszédos páros magok

Tekintsünk két egymásután következő páros rendszámú elemet ( ${}_ZE$  és  
 ${}_{Z+2}E$ ), akkor az általános szabály az, hogy legnehezebb izotópjaik neutronszáma  
különböző; mégpedig a  ${}_{Z+2}E$  elem legnehezebb izotópjának legalább két, de  
gyakran négyvel több neutronja van, mint az  ${}_ZE$  legnehezebb izotópjának.  
Kivételeket csak a 28, 50 és 82-es neutronszámmoknál találunk. Ezek a kivé-  
telek a következők:



Ugyanez igaz a legkönnyebb izotópokra, ahol a  ${}^{82}_{60}\text{Nd}^{142} - {}^{82}_{62}\text{Sm}^{144}$ , ill.  ${}^{50}_{40}\text{Zr}^{90} - {}^{50}_{42}\text{Mo}^{92}$   
elempároknál találhatók csak a legkönnyebb izotópok azonos neutronszámmal.

Itt jegyezzük meg, hogy a  ${}^{28}_{20}\text{Ca}^{48}$ -nek környezetéhez képest igen nagy a  
neutronfeleslege, mégis  $\beta$  stabil, ami egyedül azzal magyarázható, hogy úgy  
protonjai, mint neutronjai zárt héjjat alkotnak.

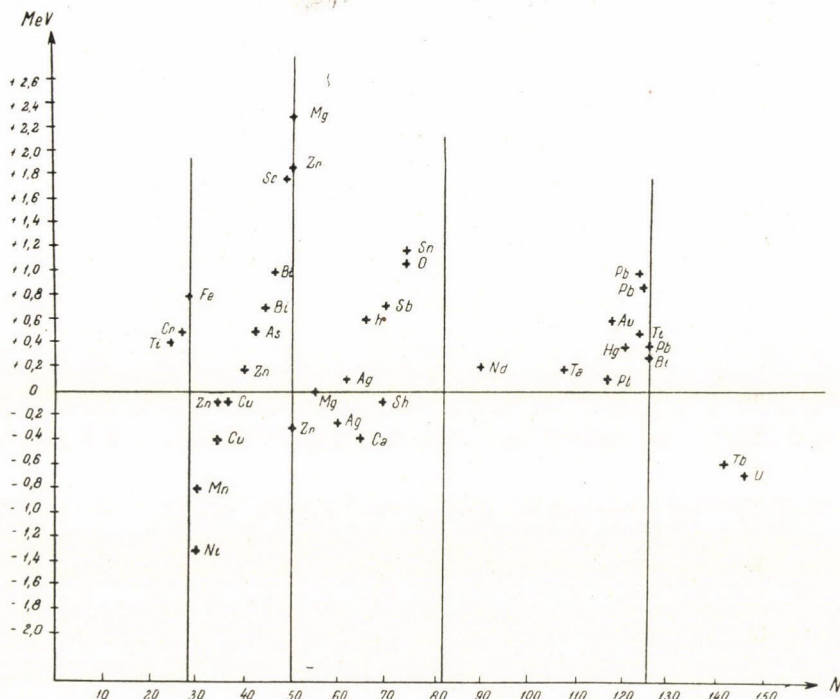
e) A kötési energia ugrásai kitüntetett számoknál

Ha a tárgyalt nukleonszámok zárt héjjakat alkotnak a magban, elvárható,  
hogy ezeknél a kötési energia ugrásokat mutasson. Ezeket az ugrásokat  
természetesen tömegspektroszkóppal nem lehet mérni, de magreakciókkal ki  
lehet mutatni. Ha a kitüntetett neutronszámokat vizsgáljuk, különösen alkalmasak  
erre a  $(\gamma, n)$  és  $(n, \gamma)$  típusú reakciók, melyek az „utolsó“ neutron kötési  
energiáját nagy pontossággal tudják megadni. Mérni lehet pl. azt a  $\gamma$  küszöb-  
energiát, mellyel a  $(\gamma, n)$  reakció bekövetkezik.

Célszerű azonban ezt a küszöbenergiát nem közvetlenül megadni — bár  
egy ilyen összeállításból is látszik, hogy a kitüntetett számokon felüli neut-  
ronok lazábban kötöttek — u. i. a mérések különböző párosságú magokon  
történnek, különböző  $Z/A$  specifikus töltés mellett s így a közvetlen össze-  
hasonlítás eléggé nehézkes. Ehelyett a következőképpen járhatunk el. Kiszá-  
míthatjuk az utolsó neutron kötési energiáját, az ú. n. félempirikus formulából,  
mely tapasztalati paraméterekkel kiváló pontossággal állítja elő minden mag  
kötési energiáját — beleértve a párossági effektust is — de folytonosan, azaz  
nem vet számot a zárt héjjak létezésével. Képezzük továbbá az így nyert energia-  
érték és a mért érték különbségét. Várható, hogy ez a különbség a kitüntetett  
számok környékén lesz a legnagyobb. A 3. ábrán ezek a különbségek vannak  
feltüntetve, az ábrán látható viszonyok megfelelnek a várakozásnak.

Ezen mérésekből, valamint az  $(n, \gamma)$ ,  $(d, p)$  reakciókból a kötési energia ugrásaira a következő értékek adódnak:

$N=28$	$\Delta E \gtrsim 1 \text{ MeV}$
$N=50$	$\Delta E \gtrsim 2 \text{ MeV}$
$N=82$	$\Delta E \gtrsim 2 \text{ MeV}$
$N=126$	$\Delta E \gtrsim 2 \text{ MeV}$



3. ábra. Az utolsó neutron kötési energiájának mért és számított értéke közti különbség, mint a mag neutronszámának a függvénye

#### f) Késleltetett neutron emisszió

Ez a sajátos jelenség a maghasadás produktummagjainak radioaktív kaszkádjánál lép fel. Midőn a kaszkád során egy mag  $\beta$  átalakuláson megy keresztül, általában magasan gerjesztett állapotban marad vissza. A kaszkád folyamatban mármost előadódhatik, hogy egy mag gerjesztési energiája elég magas ahhoz, hogy a neutronemisszió valószínűsége nagyobb legyen egy  $\gamma$  emisszió vagy egy további  $\beta$  bomlás valószínűségénél. Ilyenkor a mag neutron-t emittálhat. Ezt a jelenséget — melyet késleltetett neutronemisszióknak nevezünk — meg is figyelték az uránhasadás produktummagjának radioaktív kaszkádjaiban. Elvárható, hogy késleltetett neutronemisszió elsősorban azoknál a magoknál jelentkezzen, ahol az utolsó neutron különösen gyengén van kötve.



A megfigyelések két magon tudták ezt a jelenséget kimutatni. Ezek:  $^{51}_{38}\text{Sr}^{89}$  és  $^{83}_{56}\text{Ba}^{139}$ . Mindkettőnek egy felesleges neutronja van az 50 és 82 zárt neutronhéjakon kívül.

Ugyanezt a jelenséget megfigyelték igen energikus  $\alpha$  részeckek bombázott könnyebb magnál is. Ha az  $\alpha$  részeckek energiája elég nagy, akkor a magból több proton és neutron lép ki és a maradék mag erősen gerjesztett állapotban szintén  $\beta$  kaszkádon megy át. Az egyetlen megfigyelt késleltetett neutron emittáló mag a  $^9_8\text{O}^{17}$ , mely a  $^{10}_7\text{N}^{17} \rightarrow ^9_8\text{O}^{17} + \beta^-$  bomlás során keletkezik. Itt egy neutron van a 8-as héjjon kívül, melynek kötési energiája (4,1 MeV) igen kicsiny.

*g) Szabályosságok a magok mechanikai, mágneses és elektromos momentumaiban*

Régi tapasztalat, hogy azoknak a magoknak, melyek  $Z$ -je és  $N$ -je egyaránt páros, alapállapotban nincs mechanikai momentumuk. Ezek a magok gömbszimmetrikusak és ezért elektromos és mágneses momentumaik sincsenek. Olyan magoknál viszont, hol  $Z$  vagy  $N$  (vagy mindkettő) páratlan, igen különböző, elektromos és mágneses momentumokkal találkozunk. Ezzel kapcsolatosan már most rámutatunk arra, hogy egy olyan elméletnek, mely a magok héjyszerkezetéről számot kíván adni, nem elegendő csak a zárt héjjak létezését értelmeznie, hanem részleteiben is számot kell adnia az egyes magok mechanikai, elektromos és mágneses momentumairól.

Tekintsük először az elektromos momentumok eloszlását. Mint ismeretes, atommagoknak (mint általában kvantummechanikai rendszereknek) nincs elektromos dipólmomentumuk, de van elektromos kvadrupólmomentumuk. A kvadrupólmomentumok eloszlását a 4. ábra szemlélteti.

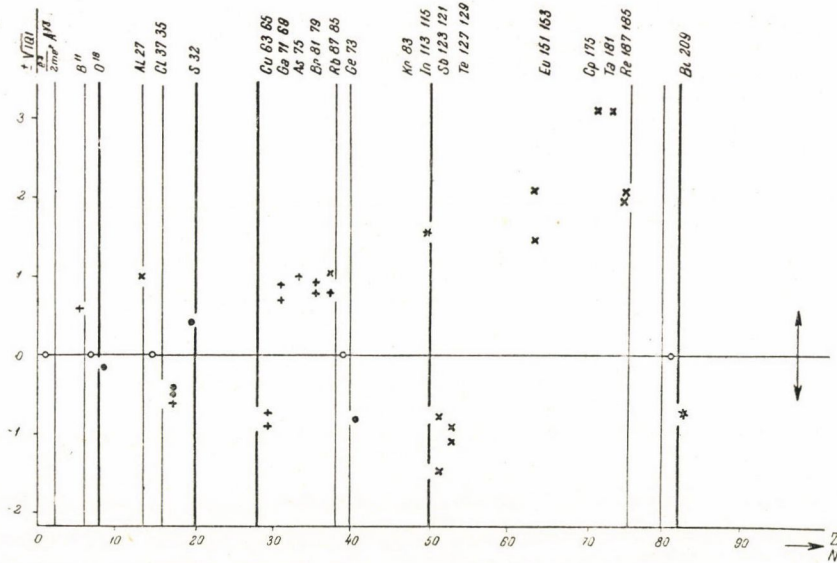
Magyarázatképpen megjegyezzük, hogy pozitív kvadrupólmomentum a klasszikus elméletben „megnyúlt” ellipszoid alakú töltéseloszlásnak felel meg, negatív kvadrupólmomentum viszont „belapult” ellipszoidnak.

A legszembetűnőbb tény a 4. ábrában kétségek kívül az, hogy a kvadrupólmomentumok előjele a kitüntetett számoknál (bár nemcsak ott, hanem 16-nál és 40-nél is) hirtelen megváltozik. Éspedig úgy, hogy szemléletesen szólva a magok közvetlenül a kitüntetett számok után belapult, előttük pedig megnyúlt ellipszoid alakúak. A kvadrupólmomentumok kvantitatív értelmezésének kérdésére még röviden rátérünk, egyelőre csak annyi fontos, hogy a 28, 50, 82 számok kitüntetett jellegét a kvadrupólmomentumok eloszlása is illusztrálja.

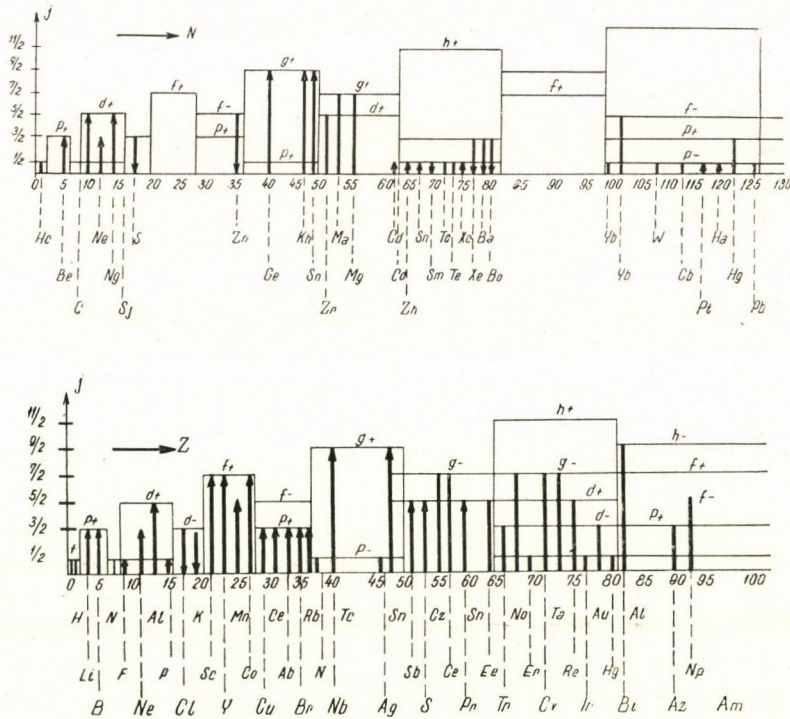
Az egyes magok mechanikai momentumait (helytelenül, de röviden spinjeit) az 5. ábra szemlélteti:

A felső ábrán az abszcissza: protonszám, az alsón: neutronszám. Az ordináta a magspin  $\hbar$  egységeiben. A nyilak a spin nagyságát jelzik. Fel, illetve lefelé irányítottáguk jelentésére rövidesen rátérünk.

Röviden megbeszéljük a magok spinjei és mágneses momentumaik közötti összefüggéseket, melyekre először *Schmidt* mutatott rá.



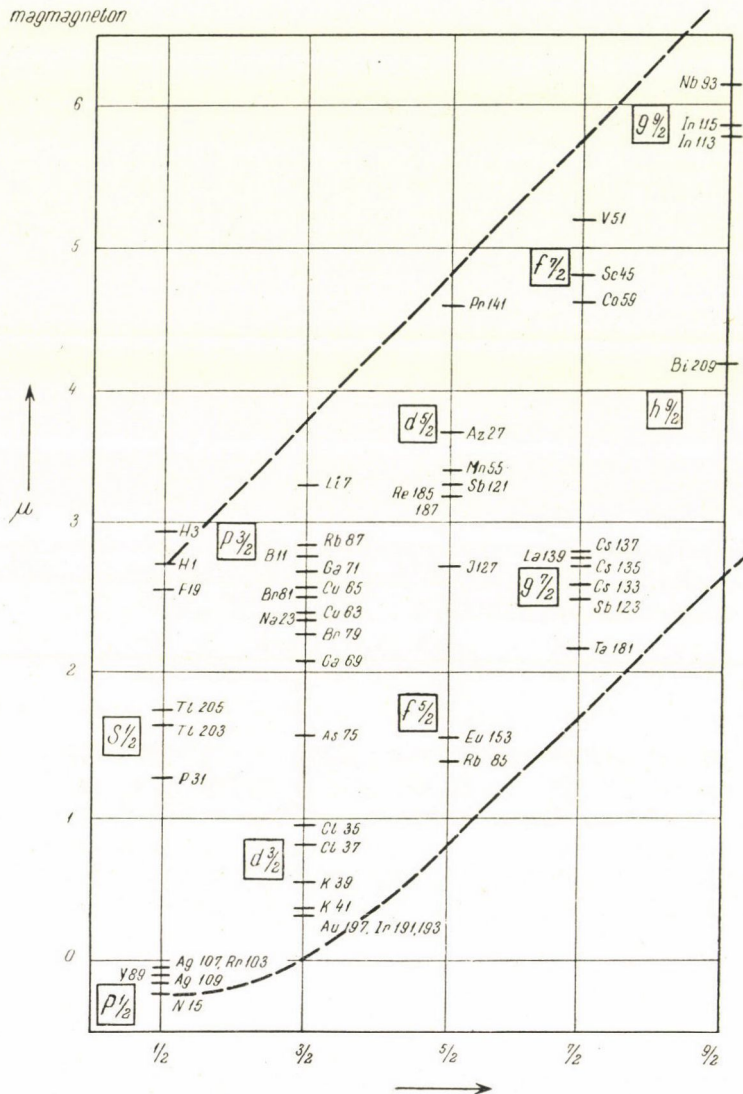
4. ábra. Elektromos kvadrupólmomentumok



5. ábra. A magok mechanikai momentuma, mint a neutron- ill. protonszámok függvénye



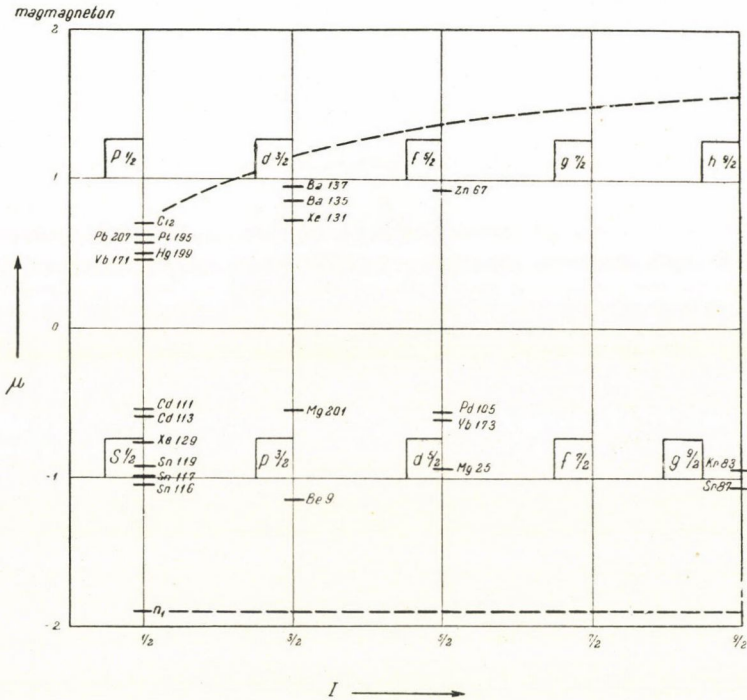
Tekintsük először azokat a magokat, melyekben a protonszám páratlan. Ha ezen magokat egy olyan koordináta-rendszerben ábrázoljuk, hol az abszcissza-tengelyre  $\hbar$  egységekben a spin van felmérve, ordinátául pedig a mágneses



5a ábra. Schmidt-diagrammok páratlan protonra

momentumokat választjuk mágmagneton egységekben, akkor azt találjuk, hogy az összes ilyen magok képei két egyenes közé esnek, sőt jelentékeny részük igen közel fekszik a két egyenes egyikéhez. (5a ábra.) Kvalitatíve azt olvashatjuk le az ábrából, hogy a magspin egy egységnyi növekedése esetén a mágneses momentum is egy egységgel nő.

Hasonlóan alakulnak a viszonyok, ha azokat a magokat tekintjük, melyekben nem a protonok, hanem a neutronok száma páratlan. Az előbb tekintett koordináta-rendszert választva ismét, azt tapasztaljuk, hogy a magok képei két egymással kb. párhuzamos egyenes között helyezkednek el. (Azt a tényt, hogy ezeken az ú. n. Schmidt-féle diagrammokon a kijelölt vonalak nem egyenesek, hanem attól kissé eltérő görbék, egy pontosabb kvantummechanikai számítás determinálja, de ezt az alább ismertetendő modell szempontjából nem szükséges figyelembe venni.)



5b ábra. Schmidt-diagrammok páratlan neutronokra

Figyelemreméltó, hogy az alsó egyenes itt már nem pozitív, hanem negatív mágneses momentumnak felel meg.

Ezeknek a Schmidt-féle diagrammoknak az elméleti értelmezése igen egyszerű és régóta ismert (kb. 15 esztendeje). Ha u. i. feltesszük, hogy — az első diagrammról szólva — a mag „páratlan protonjának” — azaz a legfelső protonnívón egyedüllevő protonnak — spinjein kívül pályamozgásából származó impulzusmomentuma is van (ennek kvantumszáma legyen szokásosan  $l$ ), továbbá, hogy a spin és pályaimpulzusmomentumok a

$$j = l \pm \frac{1}{2}$$

ú. n. belső kvantumszámmá tevődnek össze, akkor, ha ennek a protonnak a  $j$



kvantumszámát a mag teljes spinjével  $I$ -vel, az ebből eredő mágneses momentumot a mag teljes mágneses momentumával,  $\mu$ -vel azonosítjuk, egyszerű számítás után kiadódik, hogy a felső Schmidt vonalat akkor kapjuk, ha a proton spin- és pályamomentuma *parallel*, az alsót pedig, ha *antiparallel* áll.

Tehát pl. az  $I = \frac{1}{2}$  érték esetén  $l = 0$ , a mag mágneses momentuma pedig a legfelső proton mágneses momentumával azonos, melynek értéke 2,79 magmagneton. Az  $l = 1$  érték pedig megfelel egy  $j = 3/2$  kvantumszámú protonnak, midőn a spin és pályamomentumok *parallel* állanak, illetve egy  $j = 1/2$  kvantumszámú protonnak, midőn a spin és pályamomentumok *antiparallel* állanak. A mágneses momentum első esetben 4,79 magmagneton, a második esetben 3,79 magmagneton. Kiemeljük tehát, hogy e modell szerint a mag teljes spinje és mágneses momentuma is kizárólag az „utolsó” páratlan protontól származik, tehát a többi nukleonról fel kell tennünk, hogy spinjeik és mágneses momentumaik kölcsönösen kompenzálják egymást.

Hasonló módon értelmezhetjük a páratlan neutrons számú magokra vonatkozó Schmidt-féle görbéket. Ha ismét az utolsó páratlan neutront tesszük felelőssé a mag spinjéért és mágneses momentumáért, akkor a  $j = l - \frac{1}{2}$

esetben az alsó, a  $j = l + \frac{1}{2}$  összspin esetén a felső görbét kapjuk az 5b. ábrán. Éspedig azért, mert a neutron mágneses momentuma *negatív*: -1,91 magmagneton.

Könnyű ezekután belátni, hogy miért különbözik a páratlan neutrons számú magok Schmidt diagrammja a páratlan protonszámú magokétól. Mindekenelőtt előbbi esetben a mag teljes mágneses momentuma a neutron mágneses momentumától származik; a neutron pályamozgása viszont nem ad semmit a mágneses momentumhoz, mert töltése nincs. Ezért ebben a diagrammban  $I$  nem növekszik, ha  $\mu$  nő, a magok két, az abszcisszával *párhuzamos* egyenes közé esnek.<sup>1</sup>

A Schmidt görbék elméletének értékelésére még visszatérünk. Egyelőre most csak annyit kívánunk leszögezni, hogy a magok elektromos momentumai határozottan mutatják a kitüntetett nukleonszámok létezését, a spin és mágneses momentumok összefüggését pedig legalább is kvalitatíve egy extrém „független részecske”-modellel sikerült értelmezni, tehát egy olyan modellel, mely szerint egy nukleon jól definiált kvantumállapotban mozog.

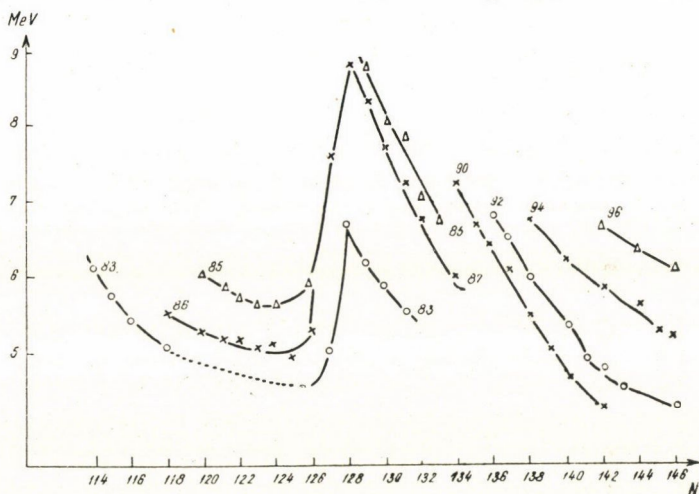
<sup>1</sup> A 4-es ábrához most jegyezzük meg, hogy a felfelé álló nyilak a  $j = l + \frac{1}{2}$ , a lefelé állók pedig a  $j = l - \frac{1}{2}$  esethez tartoznak.

## 4. Kitüntetett számok a radioaktív magok tartományában

Ebben a tartományban a  $Z=82$  és  $N=126$  jellemzőjű magokat kell megfigyelnünk. Feladatunk mindenekelőtt az  $\alpha$  bomlások egyes törvényszerűségeit megvizsgálni. Az  $\alpha$  bomlással szembeni stabilitás, illetve az  $\alpha$  bomlás energiája jó mértékei lesznek a bomló mag stabilitásának.

a) Az  $\alpha$  bomlás szabályosságai

Ismeretes, hogy az utolsó páros tömegszámú stabil mag a  $^{126}_{82}\text{Pb}^{208}$ . Ennél a magnál úgy az  $N$ , mint a  $Z$  héj le van zárva. Stabilitása érthető. Az utolsó stabil mag azonban nem ez, hanem a  $^{126}_{83}\text{Bi}^{209}$  mag. Ennek stabilitása is könny-



6a ábra. Az  $\alpha$  bomlás energiája, mint az  $\alpha$  bomló mag neutronszáma-  
nak a függvénye

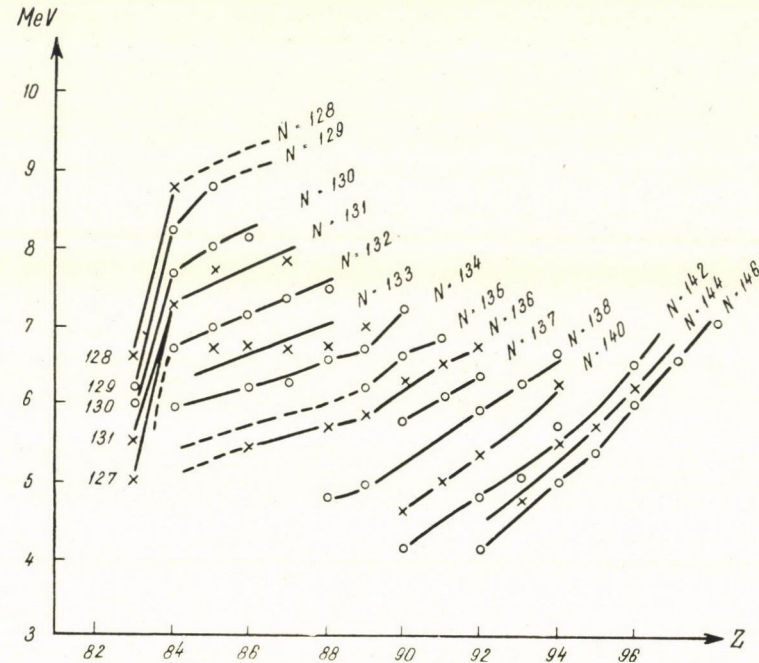
nyen érthető. Az utolsó proton ugyan kívül van a 82-es zárt  $Z$  héjjon és ezért kevésbé is van kötve<sup>1</sup>, azonban  $\alpha$  bomlás esetén a protonszám 81 lenne, azaz protonnak kellene a zárt 82-es héjból távozni. Mivel továbbá a neutronszám is zárt héjkat jelent, érthető, hogy a  $^{126}_{83}\text{Bi}^{209}$  mag  $\alpha$  bomlással szemben stabil. A  $^{126}_{84}\text{Po}^{210}$  mag viszont már radioaktív, hiszen éppen két felesleges protonja van. A neutronhéj ugyan zárt, de ez önmagában nem biztosítja a stabilitást, csupán az  $\alpha$  rész energiáját csökkentheti. Hogy ezt tényleg megteszi, azt belátjuk, ha a  $^{126}_{84}\text{Po}^{210}$   $\alpha$  energiáját (5,3 MeV) összehasonlítjuk a  $^{128}_{84}\text{Po}^{212}(\text{ThC})$  mag  $\alpha$  energiájával, hol  $\alpha$  bomlás után lezáródik úgy a proton-, mint a neutronhéj. A  $\text{ThC}$  energiája (8,8 MeV) a legnagyobb az összes ismert  $\alpha$  energiák között. Ez a tény komoly támasza a 82 és 126 nukleon-számok kitüntetettségének. Érdeemes megjegyezni ebben a vonatkozásban, hogy a  $^{127}_{83}\text{Bi}^{210}(\text{RaE})$  mag, melynek egy fölös protonja és egy fölös neutronja van,

<sup>1</sup> Ez közvetlen méréssel is igazolva van.



praktikusan nem  $\alpha$  bomló, hanem  $^{127}_{83}\text{Bi}^{210} \rightarrow ^{126}_{84}\text{Po}^{210} + e^- \beta$  bomlással  $^{126}_{84}\text{Po}^{210}$ -be megy át, mely azután  $\alpha$  bomló.

Igen feltűnő bizonyságokat találunk a  $Z=82$  és  $N=126$  számok kitüntettségére, ha megvizsgáljuk az  $\alpha$  bomlás energiáját, mint  $Z$  és  $N$  függvényét. Az ábrából világosan látszik, hogy az  $\alpha$  részek energiája ugrás-szerűen változik, ha  $Z=82$ , illetve, ha  $N=126$ .



6b ábra. Az  $\alpha$  bomlás energiája, mint az  $\alpha$  bomló mag protonszámának a függvénye

(Az ábrák részletesebb diszkussziója érdekes összefüggésekhez vezet, ezeket azonban itt most nem részletezzük.)

#### b) Egyéb tények

A radioaktív tartományban a  $Z=82$  és  $N=126$  magokra a speciálisan radioaktív jellegzetességeken kívül megtaláljuk mindazon karakterisztikus tényeket, melyeket a stabil magoknál láttunk (pl. a kötési energia ugrásai kitüntetett számok környékén, izotópgyakoriság, stb.), de nem oly szembeötlően. Egy érdekes tény azonban ismét igen markánsan mutatja a radioaktív tartományban lévő héjjszerkezetet. Ez az uránmag aszimmetrikus hasadása.

Mint ismeretes *Frenkel—Bohr—Wheeler* nyomán az uránmag hasadását kiválóan lehet értelmezni a cseppmodell alapján. Az uránmag kétrészre hasadása azonban sajátos aszimmetriát mutat és ezt már nem lehet a csepp-

modell alapján megmagyarázni. Több oka is van annak, hogy ez így történik és ezek közül az egyik az, hogy az egyik hasadási termék mindig igyekszik zárt héjjon kívül nukleont nem felvenni. Ez megnyilvánul abban, hogy a neutronszám igen ritkán haladja meg az 50, ill. a 82-es számot a hasadási produktumban. Szimmetrikus hasadásnál a két produktummag mindegyikében azonos számú ( $\sim 70$ ) neutron volna. A protonszámnál is az a helyzet, hogy praktikusán mindig teljesül az egyik produktummagra a  $Z \geq 50$  feltétel. Tehát a mag minél több teljes héjzat akar képezni hasadás után.

Mint látjuk tehát, a kitüntetett számok egzisztenciájának kérdését a tapasztalat messzemenően megerősíti. Egy sor fontos tényre a fenti felsorolásnál rá sem mutattunk. Ilyenek pl. a következők: Kitüntetett számú neutronot tartalmazó mag környezetéhez képest igen kicsi hatáskeresztmetszetet mutat neutronbefogással szemben. A  $\beta$  bomlás adatai is szemléltetően mutatják a kötési energia ugrásait a kitüntetett számok környezetében, végül az izoméria jelensége is szoros összefüggésben áll a héjzak lezáródásával.

## II. Az atommag héjszerkezetének elmélete

### 1. A független részecske modell

Azok a tények, melyek az atommag héjszerkezetére utalnak, azt bizonyítják, hogy az egyes nukleonok a magban jól definiált kvantumállapotokban („pályákon”) tartózkodnak. Az atommag azon modelljeit, melyek erre az alapfeltevésre épülnek, nevezzük „független részecske” modellnek. Ez a modell ellentmondásban áll az atommag Bohr által kifejtett statisztikus „erős kölcsönhatás”-on alapuló modelljével. Ezen ellentmondás feloldására több kísérlet történt<sup>2</sup>. Azonban e kérdés tárgyalásába itt nem mehetünk bele. Mindenesetre a továbbiak folyamán a független részecske-modell alapján fogjuk az atommag héjszerkezetének értelmezési lehetőségét vizsgálni.

A független részecske-modell kvantitatív tárgyalása a következő alapon lehetséges. Kiszemelünk egy tetszőleges nukleont. Ennek a mozgását vizsgáljuk azon potenciáltérben, melyet az összes többi nukleon közösen alakít ki. Így meghatározhatjuk a lehetséges kvantumállapotok kvantumszámait és azután a nukleonokat szukcesszíve elhelyezzük az energetikailag egymásután következő állapotokban — a Pauli elv figyelembevételével.

A potenciáltérre vonatkozóan a következő feltevésekkel lehet élni: 1. A nukleonok összessége egy derékszögű potenciálvölgyet alakít ki. 2. A nukleonok összessége egy oszcillátor potenciált alakít ki. Ez a két feltevés egyszerűségével tűnik ki és mindkettő kedvelt sémája az elméleti magfizikának. (A derékszögű potenciálvölgy  $\delta$  függvény kölcsönhatásnak, az oszcillátor-potenciál pedig rugalmas kölcsönhatásnak felel meg.) A valóság — elméleti indokok alapján — a két sémapotenciál között lehet és pedig úgy, hogy az oszcillátorpotenciál könnyű, a derékszögű völgy pedig nehéz magok esetén



adja jobb közelítését a valóságnak. A következőkben röviden megbeszéljük e két modell diszkussziójából nyerhető eredményeket.

Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy végtelen mély potenciálvölgyet — azaz hagyjuk az alagúteffektust figyelmen kívül — melynek szélessége legyen  $2R$ . A probléma radiális sajátfüggvénye:  $(\tau/2kr)^{1/2} J_{l+1/2}(kr)$ , ahol  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$  ( $E$  az energiaparaméter).  $J_{l+1/2}$ -vel a Bessel-függvényeket,  $r$ -el a középponttól mért távolságot jelöljük. Az energia sajátértékeket

$$J_{l+1/2}(kR) = 0 \quad (1)$$

egyenlet adja:

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 \omega_{nl}^2}{2m R^2}, \quad (2)$$

ahol  $\omega_{nl}$ -el az  $l$ -ik Bessel-függvény  $n$ -edik gyökhelyét jelöljük. Innen azonnal levonhatjuk azt a következtetést, hogy az atommagban a kvantumállapotok sorrendje más, mint az elektronhéjfizikában megszokott sorrend. Előbbit u. i. a Bessel-függvény gyökeinek sorrendje szabja meg. A nívósorrend, megtartva a mellékkvantumszám spektroszkópiai jelölését, a következő lesz:

$$1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, 3s, 2f, \dots$$

(A főkvantumszám jelölése eltér a héjfizikában megszokottól, itt a radiális függvény gyökeinek számát  $(+1)$  jelenti.)

Az egyes héjokban levő nukleonok számára a modell tehát a következő értékeket adja a Pauli elv szerint:

$$2, 6, 10, 2, 14, 6, 18, 10, 22, 2, 14, \dots$$

vagyis az egyes zártak gondolható héjak a következő proton ill. neutron számokat szolgáltatják:

$$2, 8, 18, 20, 34, 40, 58, 68, 90, 92, \dots$$

A kitüntetett számok közül a modell csupán néhányról ad számot és ezekről sem meggyőzően.

Nem változik lényegesen a helyzet akkor sem, ha nem végtelen, hanem véges ( $V_0$ ) mélységű potenciálgödröt tekintünk. Az energiasajátértékeket ekkor (1) ill. (2) helyett a

$$\frac{J_{l+3/2}(kR)}{J_{l-1/2}(kR)} = \frac{H_{l+3/2}(iKR)}{H_{l-1/2}(iKR)} \quad (3)$$

transzcendens egyenlet gyökei adják, ahol most  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|)$ ;  $K^2 = \frac{2m}{\hbar^2} |E|$ .

Ezen egyenlet gyökei sem változtatják meg a nívósorrendet, tehát a zárt héjakat nem adják a tapasztalattal egyezésben.

Lényegében hasonló a helyzet, ha a  $V(r) = -V_0 + \frac{m}{2} \omega^2 r^2$  oszcillátorpotenciállal dolgozunk. ( $-V_0 = \text{konstans}$ , a völgymélység az  $r = 0$  helyen,  $\omega$  frekven-

ciadimenziójú állandó.) A probléma radiális sajátfüggvénye:  $\sim F\left[\frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \varrho\right), l + \frac{3}{2}; Kr^2\right]$ , ahol  $F$  konfluens hipergeometrikus függvényt jelent,  $\varrho = \frac{V_0 + E}{\hbar\omega}$ ,  $K^2 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}$ ,  $l$  egész szám (mellékkvantumszám). A sajátfüggvény  $r \rightarrow \infty$ -re divergál, mint az a konfluens hipergeometrikus függvény aszimptotikus alakjából következik, a hullámfüggvényre kirótt határfeltétel csak úgy teljesül, ha  $F$  polinom, vagyis  $\frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{E + V_0}{\hbar\omega}\right) = -n$  (egész), azaz

$$E = \hbar\omega\left(2n + l + \frac{3}{2}\right) - V_0.$$

Az  $N = 2n + l$  kvantumszám  $l$ -el együtt páros, ill. páratlan. Adott  $N$ -hez több lineárisan független sajátfüggvény tartozik. Ha  $N$  páros,  $l = 0 \dots N$  között minden páros szám lehet. Tehát adott  $N$ ;  $\frac{N+2}{2}$  féleképpen állítható elő. Hasonlóan, ha  $N$  páratlan,  $l = 0 \dots N$  között minden páratlan szám lehet és adott  $N$ ;  $\frac{N+1}{2}$  féleképpen állítható elő. (Adott  $l$ -nél természetesen még a mágneses kvantumszám is  $2l+1$  értéket vehet fel.) Kapjuk tehát a nívósorrendre:

I. $N=0$	$l=0$	$s$	term
II. $N=1$	$l=1$	$p$	"
III. $N=2$	$l=0$ v. $2$	$(s, d)$	"
IV. $N=3$	$l=1$ v. $3$	$(p, f)$	"
V. $N=4$	$l=0$ v. $2$ v. $4$	$(s, d, g)$	"
VI. $N=5$	$l=1$ v. $3$ v. $5$	$(p, f, h)$	"
VII. $N=6$	$l=0$ v. $2$ v. $4$ v. $6$	$(s, d, g, i)$	"

A zártnak gondolható héjjak

$$2, 8, 20, 40, 70, 118, 174, \dots$$

nukleonszámoknál vannak. Mint látjuk, a tapasztalattal való egyezés itt is rossz.

Nem vezettek jobb eredményhez azok a próbálkozások sem, melyek az elektronhéjfizikában ismert eljárások alkalmazásával a statisztikus elmélet alapján kísérelték meg a zárt héjjak értelmezését.<sup>3</sup>

Megjegyezzük, hogy a protonok között működő, eddig elhanyagolt Coulomb taszítás semmit sem változtat az ismertetett eredményeken.

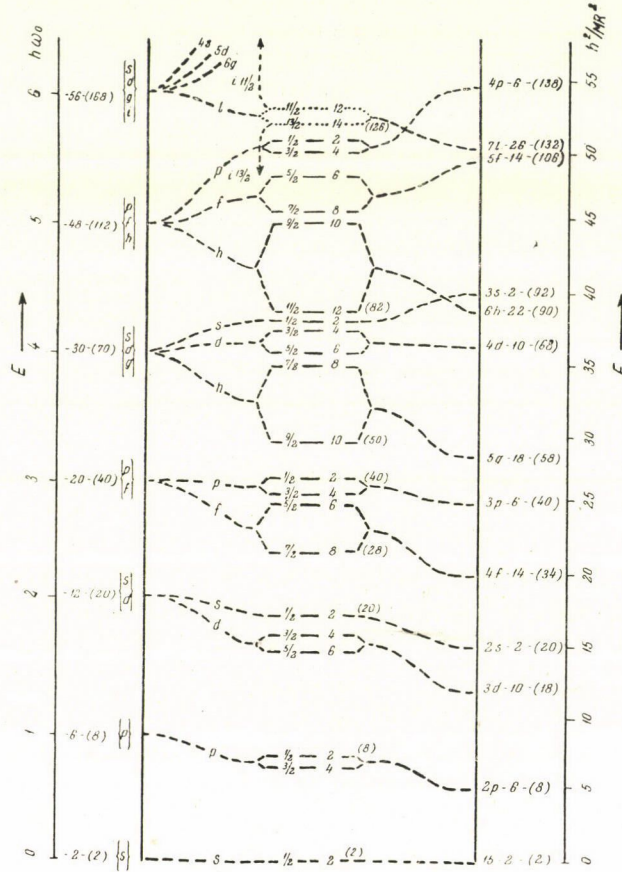
Végül arra is rá kell mutatnunk, hogy az eddig ismertetett egyszerű modellek arra is alkalmatlannak bizonyultak, hogy számot adjanak a magok olyan adatairól, mint a spin, mágneses momentum, quadrupólmomentum,  $\beta$  bomlás egyes törvényszerűségei, izoméria fellépése, stb. A független részecske-modell tehát jelentékeny bővítésre szorul.



2. A nukleonok spin és pálya impulzusmomentuma közötti erős kölcsönhatáson alapuló modell

A független részecskemodellnek olyan változatát, mely a magok héjszerkezetének a tapasztalattal teljes egyezésben való leírását szolgáltatja, 1948-ban dolgozták ki O. Haxel, J. H. D. Jensen, H. E. Suess<sup>4</sup> és tőlük függetlenül M. G. Mayer.<sup>5</sup> A modell alapfeltevései a következők.

Egy tetszőlegesen kiválasztott nukleon a többi nukleon által keltett gömbszimmetrikus potenciáltérben mozog. Ebből következik, hogy minden



7. ábra. Mag termsémája egyszerű sémapotenciálok feltételezése esetén

nukleon az  $l$  mellékkvantumszámmal jellemezhető, jól definiált kvantumállapotban van, továbbá, hogy a termék multiplicitása mindkét nukleonfajta  $2(2l+1)$ .

A nukleonok spin és pályaimpulzusmomentuma között erős kölcsönhatás van. Ennek következtében egy  $l$  pályaimpulzusmomentumhoz tartozó  $2l+1$  szintű két szintre hasad fel. Az összipulzusmomentum az egyik  $j = l + \frac{1}{2}$ , a más-

kon  $j = l - \frac{1}{2}$ . A  $(2j+1)$ -szeres multiplicitásnak megfelelően az előbbi multiplicitása  $2(l+1)$ , az utóbbié  $2l$ . A két nívó felhasadásának mértéke annál nagyobb, minél nagyobb az  $l$ .

Érdekes megvizsgálni, hogy az előbbi pontban ismertetett potenciál-sémák milyen eredményeket adnak a vizsgálandó nívókat illetően. A 7-ik ábrán\* a jobboldalon a derékszögű potenciálvölgy, a baloldalon az oszcillátorpotenciál energianívói vannak ábrázolva, középpüth a felhasadt nívók körülbelüli helyzete. Az egész számok a kérdéses nívón rendelkezésre álló helyeket, a bekarikázott számok a rendelkezésre álló helyek összegét jelentik, míg a feles számok a kérdéses nívó  $j$  értékét jelzik.

Az ábrából kvalitatíve azonnal látszik, hogy a spin-pálya kölcsönhatás következtében a termék éppen ott vannak messze egymástól, ahol ezt a tapasztalat megköveteli. Az egyszerűség kedvéért ez a séma úgy van megrajzolva, hogy két azonos  $l$ -hez tartozó nívó között nincs más  $l$ -hez tartozó nívó. Ez természetesen nem igaz általában, úgyhogy ábránk kvalitatív sémát jelent csupán. (Kvalitatív pl. már csak azért is, mert nem tesz különbséget a neutron és proton nívók között.)

A sémából könnyen leolvasható az a tapasztalati tény, hogy páros  $Z$  és  $N$  számokkal jellemezhető magok spinje kivétel nélkül mindig zérus. Ehhez csak azt kell feltenni, hogy azonos nívón levő nukleon párok impulzusmomentumai ellentétesen irányulnak, azaz zérus eredőt szolgáltatnak. A nem páros-páros típusú magok spinjeire pedig elvileg egy egyszerű és kézenfekvő hipotézist tehetünk: A mag spinjét az utolsó „párnélküli“ nukleon teljes impulzusmomentuma adja. Ez a hipotézis törvénytyszerűen igaz, ha egy nívón egyetlen nukleon van. Ha ezzel szemben egy nívón egynél több (de természetesen páratlan számú) nukleon tartózkodik, akkor a fenti hipotézis csak egy — mindenestre a legvalószínűbb — lehetőség, mely mellett más lehetőség is fennáll. Az eredő spin kialakulásának más lehetőségeire *Racah* és *Kurath* mutattak rá és valószínű, hogy a *Kurath* által adott spinkapcsolódások, ha ritkán is, de bizonyos esetekben megvalósulnak. Azt látjuk tehát, hogy a magok spinjeit a vázolt független-részecske modell pontosan és az esetek többségében rendkívül egyszerű feltevésekkel tudja magyarázni.

Bonyolultabb a helyzet a magok mágneses dipól- és az elektromos quadrupólmomentumai értelmezésénél, a vázolt modell itt is nagyjában beválhik és lényeges haladást jelent a korábbi elképzelésekkel szemben.

Meggonddolva az 5a és 5b ábrák értelmét, rögtön látjuk, hogy ha a mágneses dipólmomentumok értelmezését a spinéhez analóg módon kísérelnénk meg, azaz, ha arra az álláspontra helyezkednénk, hogy a mágneses momentumokat is az utolsó „páratlan“ nukleon mágneses momentumai határozzák meg, a magok mágneses momentumainak pontosan a Schmidt-görbéken kellene helyet fog-

\* (*Haxel—Jensen—Suess* eredeti ábrája.)



lalniok. Mint azonban az ábrából is kitűnik, legfeljebb azt állíthatjuk, hogy a mágneses momentumok nagy többsége „hajlandó“ az egyik vagy másik Schmidt-görbe köré csoportosulni. Ez a tény általában mutatja az extrém független részecske modell érvényességének korlátozott voltát.

Ugyanakkor azonban azt is megállapíthatjuk, hogy az általános jellegű eltéréstől eltekintve az e fejezetben megbeszélt modell igen jól és pontosan adja vissza a mágneses momentumok eloszlását. A tapasztalattól való eltérést kétségkívül az okozza, hogy a mágneses momentumért elsősorban felelős „párnéküli“ nukleon a mag zárt törzsével kölcsönhatásban áll. E kölcsönhatás finomabb részletei egyelőre ismeretlenek, bár sok jelentős kezdeményezés indult meg az utóbbi időben éppen e kérdés tisztázására.

Az elektromos quadropólmomentumok értelmezése modellünk alapján kiválóan sikerült. A modell pontosan megadja a quadropólmomentumok előjeleit és az előjelváltozások helyeit is (l. 4. ábra). Egy  $j > \frac{1}{2}$  nívón levő egyetlen proton negatív quadropólmomentumot, egy zárt nívón hiányzó proton pedig pozitív quadropólmomentumot ad.

A quadropólmomentumok kvantitatív meghatározásánál az a helyzet, hogy a modell általában a helyes nagyságrendet adja, néhány helyen azonban a quadropólmomentum olyan abnormisan nagy, hogy az a független részecskemoddellel nagyságrendileg sem magyarázható (l. 4. ábra). Ez a tény, valamint az a másik észrevétel, hogy a mágneses dipólmomentumok eltérése a Schmidt-görbétől éppen a nagy elektromos quadropólmomentumú magoknál nagy, vezetett az utolsó két évben a *kollektív modell* kialakulásához. Miután azonban ezek a vizsgálatok még nagyon kezdeti stádiumban vannak, részleteiből ismertetésük nem volna célszerű.

### 3. A mezonvölgy modell

A következőkben az előző pontban leírt modellt fogjuk kvantitatíve megvizsgálni.<sup>6, 7, 8</sup>

A nukleonok között ható elemi kölcsönhatást Yukawa alakú közönséges kölcsönhatásnak választjuk. Az  $i$ -ik és  $k$ -ik nukleon közötti kölcsönhatás alakja tehát legyen

$$V_{ik} = -g^2 \frac{e^{-\mu|r_{ik}|}}{|r_{ik}|}. \quad (1)$$

Itt  $g$  a kölcsönhatást közvetítő mezonter csatolási állandója,  $\mu$  a  $\pi$ -mezon tömegével áll ismert összefüggésben,  $|r_{ik}|$  pedig az  $i$ -ik és  $k$ -ik nukleon egymástól való távolsága.

A feltételezett kölcsönhatás tehát ú. n. közönséges erő. Világos, hogy ilyen kölcsönhatással nem törekedhetünk arra, hogy a mag összes tulajdonságait leírjuk, pl. bizonyosan nem alkalmas ez a kötési energia telítettségének magyarázatára. A telítettség jelenségének oka azonban ma még teljesen nyitott,

míg következményét, a nukleonszámmal arányos magtérfogatot approximatívén úgy vehetjük figyelembe, hogy a gömbalakúnak gondolt mag sugarát a tapasztalatnak megfelelően rögzítjük, azaz egy  $A$  nukleonból álló mag sugarára írjuk:

$$R = r_0 A^{1/3} \quad [r_0 = 1,42 \cdot 10^{-13} \text{ cm}]. \quad (2)$$

Ha a protonok közötti kölcsönhatást is figyelembe akarjuk venni, akkor (1) mellé fel kell írunk a Coulomb kölcsönhatást is:

$$C_{ik} = \frac{e^2}{|r_{ik}|}. \quad (3)$$

Az atommag teljes Hamilton függvénye ekkor:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_k \Delta_k + \sum_{i < k} V_{ik} + \sum_{i < k} C_{ik}. \quad (4)$$

A protonok és neutronok tömegét azonosnak vettük.

A megoldandó Schrödinger-egyenlet mármint egytest Schrödinger-egyenletekké esik szét, ha a mag teljes  $\psi$  hullámfüggvényét Hartree közelítéssel írjuk fel. Ez a probléma kezelésének nagyfokú egyszerűsítését jelenti.

Az egytest Schrödinger-egyenletek alakja, ha az egyes nukleonok  $\psi$  hullámfüggvényeit normálnak gondoljuk, a következők:

Neutronokra:

$$\Delta \psi_i + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_i - \frac{1}{2} g \Phi \right) \psi_i = 0. \quad (5a)$$

Protonokra:

$$\Delta \bar{\psi}_i + \frac{2m}{\hbar^2} \left( \bar{E}_i - \frac{1}{2} g \Phi - \frac{1}{2} e \varphi \right) \bar{\psi}_i = 0, \quad (5b)$$

ahol

$$g \Phi = \sum_k^A \int \psi_k^*(k) V_{ik} \psi_k(k) dx_k \quad (6a)$$

$$e \varphi = \sum_k^Z \int \bar{\psi}_k^*(k) C_{ik} \bar{\psi}_k(k) dx_k \quad (6b)$$

$$E = \sum_i (E_i + \bar{E}_i)$$

a mag teljes Schrödinger-egyenletének energiasajátértéke. Könnyű belátni (1) és (3) alapján, hogy a  $\Phi$  és  $\varphi$  potenciálok kielégítik a következő potenciál-egyenleteket:

$$\Delta \Phi - \mu^2 \Phi = 4\pi g \left( \sum_i^N |\psi_i|^2 + \sum_i^Z |\bar{\psi}_i|^2 \right) = 4\pi g (\varrho_p + \varrho_n) \quad (7a)$$

$$\Delta \varphi = -4\pi e \sum_i^Z |\bar{\psi}_i|^2 = -4\pi e \varrho_p. \quad (7b)$$

Ezeket az egyenleteket kell mármint megoldani. A jobboldalon álló összegek az atommag számsűrűségét reprezentálják. Ennek alakjára a következő feltevésekkel élhetünk. Feltehetjük első közelítésként, hogy az atommag számsűrűsége állandó.



$$\begin{aligned}
 \varrho_p + \varrho_n = \varrho &= \begin{cases} \varrho_0 = \frac{3}{4\pi r_0^3} & \text{ha } r < R \\ 0 & \text{ha } r > R \end{cases} \\
 \varrho_p &= \begin{cases} \varrho_{p0} = \varrho_0 \frac{Z}{A} & \text{ha } r < R \\ 0 & \text{ha } r > R \end{cases}
 \end{aligned} \quad (8)$$

Más lehetséges feltevés a következő:

$$\begin{aligned}
 \varrho_0 &= \varrho'_0 e^{-\alpha r^2} \\
 \varrho_p &= \varrho'_{p0} e^{-\beta r^2},
 \end{aligned} \quad (9)$$

ahol  $\varrho'_0$ ,  $\alpha$ ,  $\varrho'_{p0}$ ,  $\beta$  konstansok alkalmasan választandók meg. Ezen feltevésekkel a (7) egyenleteket megoldva a kapott  $\Phi$  és  $\varphi$  potenciálok (5)-be helyettesíthetők. Akkor már csak a Schrödinger-egyenletek megoldása van hátra, melyhez természetesen a különböző konstansokat is meg kell határozni, illetve választani.

Ahhoz azonban, hogy a magok héjjszerkezetének helyes értelmezéséhez eljussunk, figyelembe kell vennünk a nukleonok spin-pálya kölcsönhatását is. Ha a  $\Phi$  és  $\varphi$  potenciálokat gömbszimmetrikusnak vesszük fel, a spin-pálya kölcsönhatást leíró tag a következő alakú lesz (elhanyagolva a protonok Coulomb teréből eredő spin-pálya kölcsönhatást a magerők jóval erősebb terétől származó kölcsönhatás mellett):

$$\frac{z'}{2} \frac{g}{r} \frac{d\Phi}{dr},$$

ahol

$$z' = z \begin{cases} +l \\ -(l+1) \end{cases} = \gamma \left( \frac{\hbar}{mc} \right)^2 \begin{cases} +l \\ -(l+1) \end{cases} \quad \text{ha} \begin{cases} j = l + \frac{1}{2} \\ j = l - \frac{1}{2} \end{cases}.$$

Itt  $\gamma$  egy a spin-pálya kölcsönhatásra jellemző állandó, melynek értékét a mezonelméletből kiadódó nagyságrendben 10-nek vesszük. (5) egyenletek mármost a következőképpen hangzanak:

Neutronokra:

$$\begin{aligned}
 \Delta \psi_i + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_i - \frac{1}{2} g \Phi + \frac{z}{2} g \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} l \right) \psi_i &= 0, & \left[ j = l + \frac{1}{2} \right] \\
 \Delta \psi_i + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_i - \frac{1}{2} g \Phi - \frac{z}{2} g \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} (l+1) \right) \psi_i &= 0. & \left[ j = l - \frac{1}{2} \right]
 \end{aligned}$$

Protonokra:

$$\begin{aligned}
 \Delta \bar{\psi}_i + \frac{2m}{\hbar^2} \left( \bar{E}_i - \frac{1}{2} g \Phi - \frac{1}{2} e \varphi + \frac{z}{2} g \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} l \right) \bar{\psi}_i &= 0, & \left[ j = l + \frac{1}{2} \right] \\
 \Delta \bar{\psi}_i + \frac{2m}{\hbar^2} \left( \bar{E}_i - \frac{1}{2} g \Phi - \frac{1}{2} e \varphi - \frac{z}{2} g \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} (l+1) \right) \bar{\psi}_i &= 0. & \left[ j = l - \frac{1}{2} \right]
 \end{aligned}$$

Feladatunk ezeket az egyenleteket megoldani. Mivel az egyenletek polárkoordinátákban szeparálhatók, a sajátfüggvények alakja lesz:

$$\begin{aligned} (2l+1)^{1/2} \psi_{n,j=l+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}} &= R_{nl}(r) [(l+m+1)^{1/2} Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \alpha(\sigma) - \\ &\quad - (l-m+1)^{1/2} Y_{l,m+1}(\vartheta, \varphi) \beta(\sigma)], \\ (2l+1)^{1/2} \psi_{n,j=l-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}} &= R_{nl}(r) [(l-m)^{1/2} Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \alpha(\sigma) - \\ &\quad - (l+m+1)^{1/2} Y_{l,m+1}(\vartheta, \varphi) \beta(\sigma)], \end{aligned}$$

ahol  $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$  az ismert gömbfelületi függvény  $\alpha(\sigma)$  és  $\beta(\sigma)$  a spin-függvények,  $R_{nl}(r)$  pedig a radiális hullám-függvény, mely kielégíti a következő egyenletet:

$$R_{nl}'' + \frac{2}{r} R_{nl}' + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E_{nl} - \frac{1}{2} g \Phi + \frac{zg}{2} \frac{1}{r} \frac{d\Phi}{dr} l \right) R_{nl} - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nl} = 0.$$

s. i. t.

Feladatunk mármost ezen egyenletek  $E_{nl}$  energiasajátértékeit meghatározni.

Ehhez szükségünk van a (7) egyenletek megoldásaira. Legyen  $\bar{\Phi} = r\Phi$  és  $\bar{\varphi} = r\varphi$ , kapjuk — ha e potenciálokat gömbszimmetrikusnak tételezzük fel — és vesszövel ismét az  $r$  koordináta szerinti differenciálást jelöljük

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}'' - \mu^2 \bar{\Phi} &= 4\pi g \varphi r \\ \bar{\varphi}'' &= -4\pi e \varphi_r r. \end{aligned}$$

A határfeltételek a szokásosak,  $\Phi$  és  $\varphi$  a zérus helyen véges legyen, a végtelenben eltűnjön.

A (8) sűrűségfeltevés mellett a potenciálegyenlet keresett megoldásai:

$$\begin{aligned} \Phi_1 &= a \left[ (1+x_0) e^{-x_0} \frac{\sinh x}{x} - 1 \right] \quad (x < x_0) \\ \Phi_2 &= a x_0 \left[ (1+x_0) \frac{\sinh x_0}{x_0} - e^{x_0} \right] \frac{e^{-x}}{x} \quad (x > x_0), \end{aligned}$$

ahol

$$x = \mu r \quad x_0 = \mu R \quad a = \frac{3g}{\mu^2 r_0^3}.$$

Hasonlóan

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= \frac{3}{2} \frac{Ze\mu}{x_0} - \frac{Ze\mu}{2x_0^3} x^2 \quad (x < x_0) \\ \varphi_2 &= \frac{Ze\mu}{x} \quad (x > x_0) \end{aligned}$$

(9a) sűrűségfeltevés mellett pedig

$$\Phi(r) = g \varphi_0 \left( \frac{\pi}{\alpha} \right)^{3/2} \frac{e^{\mu^2/4\alpha}}{2} \left\{ \frac{e^{\mu r} \left[ \Phi_G \left( \sqrt{\alpha} r + \frac{\mu}{2\sqrt{\alpha}} \right) - 1 \right] + e^{-\mu r} \left[ \Phi_G \left( \sqrt{\alpha} r - \frac{\mu}{2\sqrt{\alpha}} \right) + 1 \right]}{r} \right\},$$

ahol  $\alpha, \varphi_0$  állandók,  $\Phi_G(x)$  pedig az ismert Gauss-féle hibafüggvény.



A protonok Coulomb-terét leíró (9b) egyenlet megoldására nem lesz szükségünk.

A  $\Phi$  potenciálban szereplő  $\varrho_0$  és  $\alpha$  állandók értékét a következő feltételekből határozzuk meg:

$$\int_0^{\infty} \varrho_0 e^{-\alpha r^2} r^2 dr = \frac{A}{4\pi}$$

$$\int_0^R \varrho_0 e^{-\alpha r^2} r^2 dr = \frac{A-1}{4\pi}.$$

Az utóbbi feltétel azt jelenti, hogy olyan sűrűségeloszlást választottunk, ahol a mag  $R$  sugarán kívül átlagosan egy nukleon foglal helyet. Innen kapjuk  $\varrho_0$  és  $\alpha$  értékeire:

$$\varrho_0 = A \left( \frac{\alpha}{\pi} \right)^{3/2}; \quad \alpha = \frac{6,25}{r_0^2 A^{2/3}}.$$

A potenciálok ismeretében mármost csak a Schrödinger-egyenlet integrálása van hátra. Az egyetlen határozatlan mennyiséget, a nukleonok kölcsönhatására jellemző  $g$  állandót teljesen önkényesen választjuk meg. A  $g$  választása lényegében mértékegység választásának felel meg, mert bennünket most csak az energia nivók *relatív* helyzete érdekel. Számításainkat  $g=5e$ ,  $g=3,5e$  értékkel végeztük el, melyek a  $g$  valóságos értékének (mely ugyan még nem egész pontosan ismert) nagyságrendjébe esnek. Sajnos, a kapott potenciálok mellett a Schrödinger-egyenletet analitikusan megoldani nem lehet, ezért az egyenletet numerikusan kell integrálni. A fő hangsúly természetesen az energiasajátértékek meghatározásán van.

Az egyenletek numerikus integrálásánál a következőképpen járhatunk el. A megoldandó egyenletet az  $f(r)=rR$  függvény bevezetésével a következő alakba írhatjuk:

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \left( -\lambda_{nl} + U_l(x) - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) f = 0,$$

ahol

$$\lambda_{nl} = -\frac{2mE_{nl}}{\hbar^2 \mu^2} \quad (E < 0); \quad -U_l(x) = \frac{2m}{\hbar^2 \mu^2} V_l(x),$$

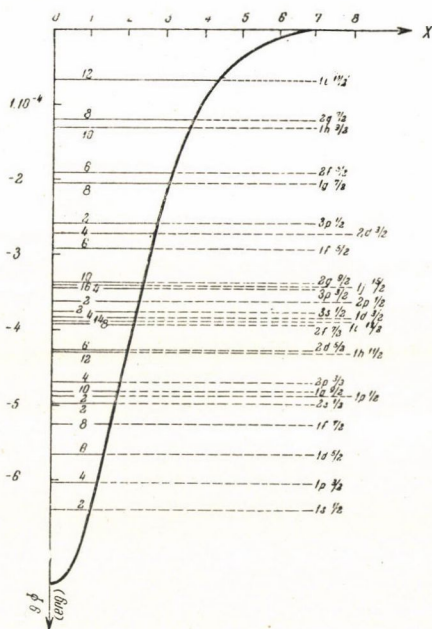
míg  $V_l(x)$  a potenciál, mely tartalmazza a spin-pálya kölcsönhatást leíró tagot és ennek következtében  $l$ -et, mint paramétert. Ebből az egyenletből  $f(x)$  alakját úgy határozhatjuk meg, hogy a második differenciálhányados helyett differenciahányadost veszünk:

$$f''(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2},$$

azaz

$$f(x+\Delta x) \approx \left\{ (\Delta x)^2 \left[ \lambda - U_l(x) + \frac{l(l+1)}{x^2} \right] + 2 \right\} f(x) - f(x-\Delta x).$$

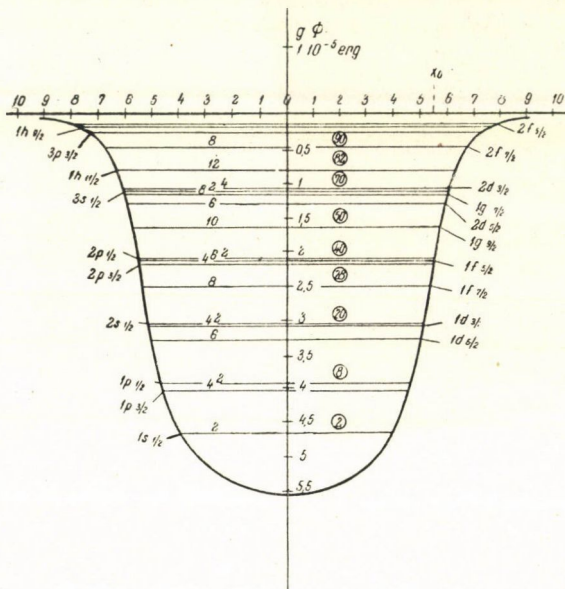
Az  $f$  függvénynek ki kell elégítenie az  $f(0)=0$  és  $f(\infty)=0$  határfeltételeket. A  $\Delta x$  helyen az  $f(x)$  függvénynek önkényes kezdeti értéket adhatunk, ami a függvény normáját változtatja meg csupán. Ily módon az  $f(x)$  függvény lépésről lépésre kiszámítható. A  $\lambda$  paramétert pedig úgy kell megválasztani, hogy az  $f(\infty)=0$  feltétel teljesüljön, praktikusán, hogy az  $f(x)$  függvény kb. a mag sugár másfélszeresénél tűnjön el. Midőn a hullámfüggvény radiális gyökeinek száma egy,  $\Delta x=0,5$ , midőn a radiális gyökök száma egynél nagyobb,  $\Delta x=0,25$  értékkel célszerű számolni.\*





Ha a (9) sűrűségfeltevéssel (Gauss sűrűség) dolgozunk, a kapott nívó-sorrend igen távol áll a tapasztalatitól (8. ábra). Sajátságos, hogy a 20, 50, 82, 126, mint betöltési számok szerepelnek a kapott nívó-sorrendben, de nem mint zárt héjjak. Az 50 és 82 nukleont tartalmazó nívók szomszédjaiktól való távolsága pl. a számítási hibahatáron belül van ( $1h_{11/2}$  és  $2d_{5/2}$ , ill.  $1d_{3/2}$  és  $3s_{1/2}$ ). Azaz az egyes nívók értékeiben való igen kicsiny változás is már más betöltési számokat adhat. Ezenfelül pedig a spin és mágneses momentum értékeire általában egészen rossz az egyezés a tapasztalattal.

Lehetséges, hogy kisebb spin-pálya kölcsönhatás esetén az egyezés javulna, de hogy a javulás kielégítő mértékű legyen, az aligha valószínű.



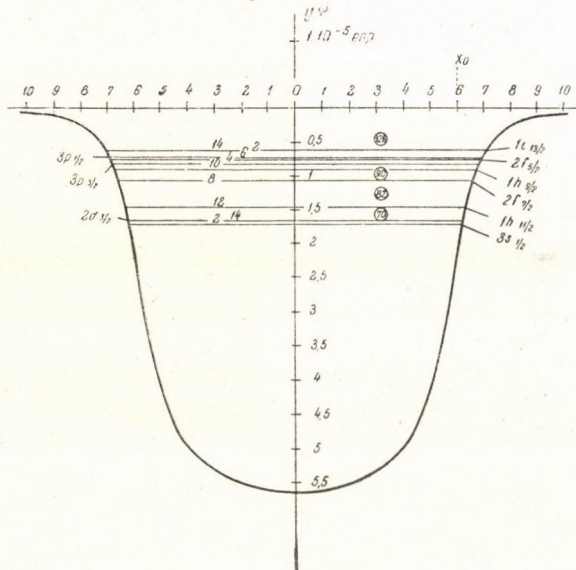
9a ábra.  $^{96}_{64}\text{Gd}^{160}$  mag energianívói konstans sűrűség feltételezésével,  
 $g = 3,5e$

A (8) sűrűségfeltevést, azaz konstans sűrűséget használva a kapott nívó-sorrend a tapasztalattal meglepően jó egyezést mutat. A 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 nukleonszámok nemcsak mint betöltési számok szerepelnek, hanem mint zárt héjjak is. Az ábráról szembetűnően látszik (9a, 9b), hogy a 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 nukleont tartalmazó nívókat kiugróan nagy távolságban követik csak a további energianívók. Ez egyértelműen a kitüntetett számokat tartalmazó magok stabilitására, a héjmodellre utal. A számításokat úgy neutron, mint protonnívókra elvégeztük, különböző tömegszámok esetén. A kapott eredményeket a cikk végén foglaljuk össze táblázatokban.

A konstans sűrűséggel kiszámított nívó-sorrendből még néhány figyelemre-méltó tényt olvashatunk le.

Könnyebb magoknál az  $1d_{5/2}$  és  $2s_{1/2}$  nívók felcserélődnek (1—4. táblázat), nehezebb magoknál e csere megszűnni látszik. E két nívó felcserélődése a tapasztalattal összhangban áll. A 4. ábrából u. i. egyszerűen leolvasható, hogy pl. a  $^{16}_{15}\text{P}^{31}$  mag spinjére mérésekből  $1/2$  adódik, a 6. ábrán lévő nívó-sorrend alapján várható  $\frac{3}{2}$  helyett s ugyanez a helyzet a  $^{15}_{14}\text{Si}^{29}$  magnál is.

Némely magnál az  $1f_{7/2}$  és  $2p_{3/2}$  nívók cserélődnek fel (5, 6 táblázat). A kísérleti adatokkal azonban ez is összhangban áll. Tekintsük u. i. ismét az 5. ábrát. A  $^{34}_{29}\text{Cu}^{63}$  mag spinje pl.  $3/2$ , azaz a 29. protonja nem lehet az  $1f_{7/2}$  nívón, csak a  $2p_{3/2}$ -en. Ugyancsak ez a helyzet a  $^{34}_{29}\text{Cu}^{63}$  és a  $^{38}_{31}\text{Ga}^{69}$  magoknál is.



9b ábra.  $A = 212$ -hez tartozó felső nívók  $g = 3,5e$ -vel számolva.

Az  $\text{Ag}^{107}$  és az  $\text{Ag}^{109}$  spinjére vonatkozó feltevést — hogy a  $p_{1/2}$  és  $g_{7/2}^+$  nívók közelsége miatt átcsoportosítás volna lehetséges — a modell nem erősíti meg. Bár kétségtelen, hogy a kölcsönhatás intenzitásának növelésével a két nívó eléggé közel kerülhet egymáshoz (megszűnik a 40-es szám kitüntetettsége).

A  $3s_{1/2}$  és  $1g_{7/2}$  nívók távolsága a számítási hibán belül esik. A  $2d_{5/2}$  és  $1g_{7/2}$  nívók felcserélődését a tapasztalat megerősíti. Példa erre az  $^{70}_{51}\text{Sb}^{121}$   $5/2$  spinje.

A  $^{98}_{67}\text{Ho}^{165}$   $7/2$  spinjét az  $f$  és  $h$  nívók átcsoportosításával lehet magyarázni. Ez a magyarázat erősebb kölcsönhatást feltételezve nem látszik valószínűnek. Gyengébb kölcsönhatással inkább van lehetőség az átcsoportosításra. Említésre méltó továbbá, hogy a  $h_{11/2}$  term jóval közelebb fekszik a  $d_{5/2}$  termhez, mint azt a derékszögű potenciálvölgy sémája mutatná. (A távolság kisebb a számítási hibánál.)



Meg kell még jegyeznünk, hogy a (8) sűrűségfeltevéssel kapott egyrészecske hullámfüggvények négyzetösszege nem Gauss-szerű sűrűségeloszlást ad. Az erőfeltevés nyilvánvalóan elégtelen volta miatt azonban nincs értelme a módszert iterálni.

Befejezésül köszönetet kívánok mondani Marx György kollegámnak értékes megjegyzéseiért, Ziegler Máriának, Rozsnyai Balázsnak, Halmágyi Margitnak és Sebestyén Klárának a numerikus számítások végrehajtásáért.

### IRODALOM

1. A tapasztalati eredmények kiváló összefoglalása található *Haxel—Jensen és Suess*: Das Schalenmodell des Atomkerns c. dolgozatában. (Ergebnisse der exakt. Naturwiss. Bd. XXVI. 244, 1952.) Dolgozatunk első részében elsősorban az ott összeállított tapasztalati tények egyrészére hivatkozunk. L. még: *M. G. Mayer* Phys. Rev. 78, 16, 1950. A héjjszerkezettel kapcsolatos táblázatok közül megemlíthetjük a következő fontosabbakat: *J. E. Mack*: Rev. Mod. Phys. 22, 64, 1950, *Klinkenberg*: Rev. Mod. Phys. 24, 63, 1952, *M. G. Mayer*, *S. A. Moszkowszki*, *L. W. Nordheim*: Rev. Mod. Phys. 23, 322, 1951.
2. *V. Weisskopf*: Science 113, 101, 1953.
3. *L. pl. Yang*: Proc. Phys. Soc, 64, 632, 1951, vagy *P. Gombás*: Acta Physica Hungarica 2, 247, 1952.
4. *O. Haxel, J. H. D. Jensen u. H. E. Suess*: Zsf. für Physik 128, 295, 1950-
5. *M. G. Mayer*: Phys. Rev. 75, 1969, 1949.
6. *G. Szamosi*: Naturwiss. 40, 103, 1953.
7. *G. Szamosi*: Naturwiss. 40, 433, 1953.
8. *G. Szamosi*: Acta Physica Hungarica (megjelenőben).

1. táblázat

term	$-E \cdot 10^{-5} \text{ erg}$
$1s_{1/2}$	8,008
$1p_{3/2}$	6,470
$1p_{1/2}$	5,868
$1d_{5/2}$	4,898
$2s_{1/2}$	4,400
$1d_{3/2}$	3,661

$^{20}_{20}\text{Ca}^{40}$  mag neutronnívói ( $g=5e$ )

2. táblázat

term	$-E \cdot 10^{-5} \text{ erg}$
$1s_{1/2}$	6,704
$1p_{3/2}$	5,199
$1p_{1/2}$	4,631
$1d_{5/2}$	3,795
$2s_{1/2}$	3,126
$1d_{3/2}$	2,575

$^{20}_{20}\text{Ca}^{40}$  mag protonnívói ( $g=5e$ )

3. táblázat

term	$-E \cdot 10^{-5} \text{ erg}$
$1s_{1/2}$	9,51
$1p_{3/2}$	8,36
$1p_{1/2}$	8,01
$1d_{5/2}$	7,11
$2s_{1/2}$	6,67
$1d_{3/2}$	6,47
$1f_{7/2}$	5,80
$2p_{3/2}$	5,27
$2p_{1/2}$	4,83
$1f_{5/2}$	4,80
$1g_{7/2}$	4,33

$^{82}_{39}\text{Kr}$  mag neutronnívói ( $g=5e$ )

4. táblázat

term	$-E \cdot 10^{-5} \text{ erg}$
$1s_{1/2}$	7,51
$1p_{3/2}$	6,34
$1p_{1/2}$	6,07
$1d_{5/2}$	5,10
$2s_{1/2}$	4,70
$1d_{3/2}$	4,53
$1f_{7/2}$	3,83
$2p_{3/2}$	3,03
$1f_{5/2}$	2,89

$^{82}_{36}\text{Kr}$  mag protonnívói ( $g=5e$ )

5. táblázat

term	$-E \cdot 10^{-5} \text{ erg}$
$1s_{1/2}$	10,382
$1p_{3/2}$	9,479
$1p_{1/2}$	9,304
$1d_{5/2}$	8,493
$2s_{1/2}$	8,175
$1d_{3/2}$	8,133
$1f_{7/2}$	7,473
$2p_{3/2}$	7,005
$1f_{5/2}$	6,871
$2p_{1/2}$	6,770
$1g_{7/2}$	6,370
$2d_{5/2}$	5,801
$3s_{1/2}$	5,500
$1g_{7/2}$	5,467
$2d_{3/2}$	5,333
$1h_{11/2}$	5,200
$2f_{7/2}$	4,564
$1h_{9/2}$	3,996

$^{143}_{60}\text{Nd}$  mag neutronnívói ( $g=5e$ )

6. táblázat

term	$-E \cdot 10^{-5} \text{ erg}$
$1s_{1/2}$	7,757
$1p_{3/2}$	6,938
$1p_{1/2}$	6,804
$1d_{5/2}$	6,035
$1d_{3/2}$	5,718
$2s_{1/2}$	5,701
$1f_{7/2}$	5,066
$2p_{3/2}$	4,598
$1f_{5/2}$	4,514
$2p_{1/2}$	4,363
$1g_{7/2}$	4,029
$2d_{5/2}$	3,394
$1g_{7/2}$	3,227

$^{143}_{60}\text{Nd}$  mag protonnívói ( $g=5e$ )



7. táblázat

term	$-E \cdot 10^{-5} \text{ erg}$
$1s_{1/2}$	10,850
$1p_{3/2}$	10,114
$1p_{1/2}$	9,981
$1d_{5/2}$	9,311
$1d_{3/2}$	9,044
$2s_{1/2}$	9,044
$1f_{7/2}$	8,440
$2p_{3/2}$	8,074
$1f_{5/2}$	8,041
$2p_{1/2}$	7,907
$1g_{9/2}$	7,506
$2d_{5/2}$	7,030
$1g_{7/2}$	6,904
$3s_{1/2}$	6,804
$2d_{3/2}$	6,703
$1h_{11/2}$	6,57
$2f_{7/2}$	5,97
$1h_{9/2}$	5,70
$3p_{3/2}$	5,63
$1i_{13/2}$	5,55
$2f_{5/2}$	5,43
$3p_{1/2}$	5,40
$2g_{9/2}$	4,84

$^{129}_{83}\text{Bi}^{212}$  mag neutronnívói ( $g=5e$ )

8. táblázat

term	$-E \cdot 10^{-5} \text{ erg}$
$1s_{1/2}$	7,674
$1p_{3/2}$	7,005
$1p_{1/2}$	6,938
$1d_{5/2}$	6,336
$1d_{3/2}$	6,102
$2s_{1/2}$	6,002
$1f_{7/2}$	5,467
$1f_{5/2}$	5,166
$2p_{3/2}$	5,066
$2p_{1/2}$	4,932
$1g_{9/2}$	4,631
$1g_{7/2}$	4,096
$2d_{5/2}$	4,096
$3s_{1/2}$	3,862
$2d_{3/2}$	3,828
$1h_{11/2}$	3,726
$2f_{7/2}$	3,093
$1h_{9/2}$	2,959

$^{129}_{83}\text{Bi}^{212}$  mag protonnívói ( $g=5e$ )

# A HF-MOLEKULA NÉHÁNY ÁLLANDÓJÁNAK HULLÁMMECHANIKAI MEGHATÁROZÁSA\*

NÁRAY ZSOLT

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest  
Kozmikus Sugárzási Osztály

Az ionmodell alapján a HF-molekula néhány jellemző állandóját számítjuk ki a hullám-mechanikai perturbációszámítás segítségével. Az energiafüggvény, illetve a dipólus-momentum levezetése a Hartree-módszer közelítő sajátfüggvényeinek, vagy a Slater-féle sajátfüggvényeknek stb., felhasználásával lehetővé teszi további hidrogén-halogenidek tisztán analitikus vizsgálatát. Az elméleti úton végrehajtott vizsgálatok a tapasztalattal jól egyező eredményeket adnak.

1. §. A hidrogén-halogenidek tulajdonságainak vizsgálatával eddig már több szerző foglalkozott.<sup>1</sup> Újabb eredményekről számolnak be: *Horváth J.* [1], *Gáspár R.* és *Kónya A.* [2], továbbá *C. R. Müller* és *H. Eyring* [3].

*Horváth J.* a *Gombás* és *Neugebauer* [4] által alkalmazott eljárás konvergencia-problémáit vizsgálja és a fellépő improprius integrálra egy közelítő formulát határoz meg. Az ily módon kapott eredmény jól egyezik a *Gombás* és *Neugebauer* által kiszámított eredménnyel.

*Gáspár R.* és *Kónya A.* a HJ-molekula állandóit a statisztikus modellből adódó sűrűségeloszlás alkalmazásával számítja ki.

A „molecular-orbital” módszer továbbfejlesztéseként *H. Eyring* és *C. R. Müller* kidolgozta a „semilocalised orbital” eljárást. Utóbbit *C. R. Müller* a HF-molekula vizsgálatára használta fel. Ennél a módszernél az eredmények jobban egyeznek a mért értékekkel, mint a „molecular orbital” eljárásnál.

2. §. A következőkben a hidrogén-halogenideknek a HCl-molekulára kidolgozott kvantummechanikai elméletét, [5], az energiakifejezésnek analitikus úton való kiértékelésével számításra alkalmasabb formára kívánjuk hozni.

Ennek végrehajtására az  $n, l$  elektron radiális sűrűségeloszlását a nem-perturbált F-anionban a következő formában vesszük fel:

$$R_{n,l}^2(\alpha_{n,l,i}, \beta_{n,l,i}, \gamma_{n,l,i}) = \sum_i \alpha_{n,l,i} r^{\beta_{n,l,i}} e^{-\gamma_{n,l,i} r}, \quad (1)$$

ahol  $n$ , illetve  $l$  a fő-, ill. mellék-kvantumszámot jelenti.

\* Érkezett 1953. okt. 1.

<sup>1</sup> Az erre vonatkozó irodalom összeállítását lásd pl. [5].



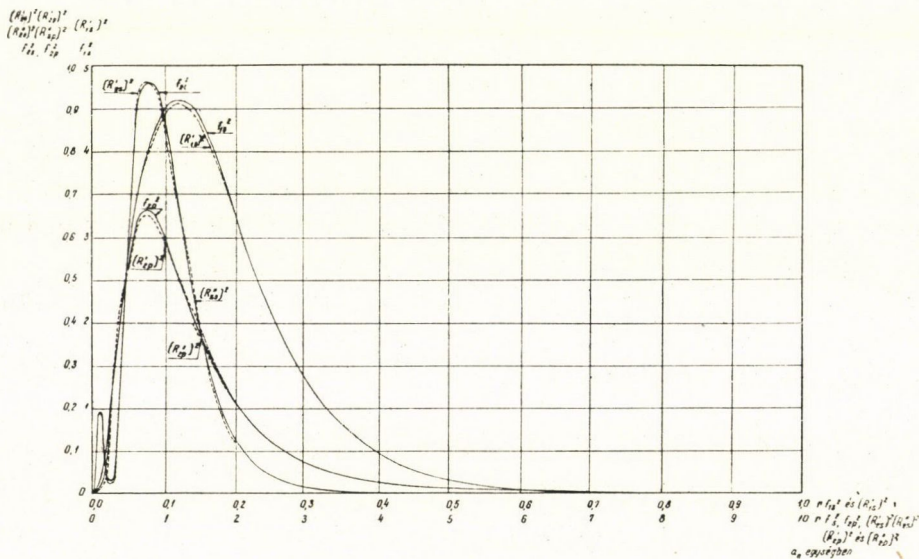
Az (1) képletben határozatlanul hagyott  $\alpha_{n,l,i}$ ,  $\beta_{n,l,i}$ ,  $\gamma_{n,l,i}$  paraméterek a számítás követelményeinek megfelelően különböző módon határozandók meg. Például az  $R_{n,l}$  radiális sajátfüggvények paramétereit a Slater-féle eljárással határozhatjuk meg, de ebben az esetben empirikus adatok felhasználása válik szükségessé. Megjegyzendő, hogy Gombás P. és Gáspár R.-nek [6] sikerült a Slater-féle sajátfüggvények paramétereit egy variációs elvből levezetni. Megemlítendő azonban, hogy az energiaképlet (lásd alább) analitikus kiértékelésének megkönnyítése végett az így meghatározott  $\beta_{n,l,i}$ -knek egész számoknak kell lenniük.

Egyes ionok esetében a „self-consistent field” módszerrel kiszámított radiális elektronsűrűség tabellázva rendelkezésre áll és így analitikus közelítő függvények segítségével a többtest-probléma exakt megoldásának alkalmazása lehetővé válik.

A továbbiak folyamán  $R_{n,l}^2$  helyett az egyes radiális sűrűségek összegét

$$D(r) = 2 \sum_{n=1}^N \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) R_{n,l}^2 = \sum_j \alpha_j r^{\beta_j} e^{-\gamma_j r} \quad (1a)$$

fogjuk használni, ahol  $N$  az anion legutolsó betöltött elektronhéjához tartozó főkvantumszám. Az egyszerűség kedvéért (1a)-ban  $2(2l+1) \alpha_{n,l,i} = \alpha_j$  helyettesítést végeztünk és egyidejűleg  $\beta_{n,l,i}$  helyett  $\beta_j$ -t, végül  $\gamma_{n,l,i}$  helyett  $\gamma_j$ -t írtunk. Mindemellett azonban az ismeretlen paramétereknek az említett eljárás szerinti meghatározása könnyebb egyes elektronok esetében.



1. ábra

A következőkben a fent ismertetett célkitűzés értelmében kiszámítjuk a HF-molekula állandóit empirikus és fél-empirikus paraméterek igénybevétele

nélkül; egyúttal az energiakifejezést, további felhasználása érdekében, mint az (1) egyenletben határozatlanul hagyott paraméterek függvényét állítjuk elő.

3. §. Az F-anionok sajátfüggvényeit *F. W. Brown* [7] táblázataiból vettük. Ezek lényegileg a Hartree-egyenletek megoldásai, figyelembevéve az egyes mellékkvantumszámokhoz tartozó elektronok kicserélődési kölcsönhatását is.

Az 1. ábrán az *F. W. Brown* által tabellázott  $f_{n,l}$  radiális sajátfüggvények négyzeteit és az általunk meghatározott közelítő függvényeket tüntettük fel.

Az ionmodell feltevéseinek megfelelően a molekula kötését, az azonos töltésű magok elektrosztatikus tasztításától eltekintve, úgy tekintjük, mint az F-ion gömbszimmetrikus töltéseloszlásának a H-kation által előidézett perturbációját.

Eszerint a kötési energiának a perturbációtól származó része a *H. Hellmann* [8] által megadott perturbációs eljárás (l. [5]<sup>2</sup>) segítségével a következő formában fejezhető ki:

$$U(\delta) = \left\{ \sum_{n,l} \int \psi_{n,l}^* u(r, \delta, \vartheta) \psi_{n,l} d\tau + \right. \\ + \frac{2 \left[ \sum_{n,l} \int \psi_{n,l}^* u(r, \delta, \vartheta) v(r, \delta, \vartheta, m) \psi_{n,l} d\tau \right. \\ \left. + \sum_{n,l} \int \psi_{n,l}^* \text{grad}^2 v(r, \delta, \vartheta, m) \psi_{n,l} d\tau \right. \\ \left. - \frac{\sum_{n,l} \int \psi_{n,l}^* u(r, \delta, \vartheta) \psi_{n,l} d\tau \int \psi_{n,l}^* v(r, \delta, \vartheta, m) \psi_{n,l} d\tau}{\sum_{n,l} \int \psi_{n,l}^* \text{grad}^2 v(r, \delta, \vartheta, m) \psi_{n,l} d\tau} \right]^2 \left. \right\} \frac{e_0^2}{a_0}, \quad (2)$$

ahol  $d\tau$  a háromdimenziós tér térfogatelemét jelenti,  $e_0$  az elektronok töltése és  $a_0$  a legkisebb Bohr-rádiusz. A (2) egyenletben az első, ill. második tag,  $U_1(\delta)$  ill.  $U_2(\delta)$ , az első, illetve másodfokú perturbációs energiának felel meg.

A (2) képletben  $u(r, \delta, \vartheta)$  a proton polarizációs potenciálja a 2. ábra jelöléseivel a következőképpen van definiálva:

$$u(r, \delta, \vartheta) = \begin{cases} \frac{1}{\delta} \sum_{v=1}^{\infty} P_v(\cos \vartheta) \left( \frac{r}{\delta} \right)^v & \text{ha } |r| < \delta \\ \frac{1}{r} \sum_{v=0}^{\infty} P_v(\cos \vartheta) \left( \frac{\delta}{r} \right)^v - \frac{1}{\delta} & \text{ha } |r| > \delta, \end{cases} \quad (3)$$

ahol  $P_v(\cos \vartheta)$  a  $v$ -ed fokú Legendre-féle polinom.

Mivel a perturbált sajátfüggvények

$$\varphi_{n,l} = \psi_{n,l} [1 + \lambda v(r, \delta, \vartheta, m)] \quad (4)$$

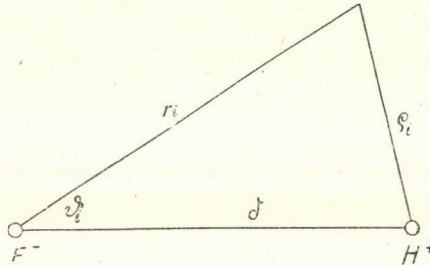
<sup>2</sup> Az itt használt jelölések az [5]-től részben eltérnek.



regularitási feltételeinek is egyidejűleg teljesülniök kell, legyen

$$v(r, \delta, \vartheta, m) = \begin{cases} \frac{1}{\delta} \sum_{v=1}^m P_v(\cos \vartheta) \left(\frac{r}{\delta}\right)^v & \text{ha } |r| < \delta \\ \frac{1}{r} \sum_{v=0}^m P_v(\cos \vartheta) \left(\frac{\delta}{r}\right)^v - \frac{1}{\delta} & \text{ha } |r| > \delta, \end{cases} \quad (5)$$

ahol  $m$  véges. (4)-ben  $\lambda$  variációs paraméter, amely a perturbált rendszer energiájának minimumfeltételéből határozható meg.



2. ábra

A (2) képletben fellépő  $\psi_{n,l}$  sajátfüggvény és  $R_{n,l}$  között alábbi összefüggés áll fenn:

$$\psi_{n,l} = (4\pi)^{-1/2} \frac{R_{n,l}}{r}. \quad (6)$$

Ha az  $E(\delta)$  disszociációs energiát akarjuk megkapni,  $U(\delta)$ -t ki kell egészítenünk a mag taszító hatásából származó energiával az

$$E(\delta) = -U(\delta) - \frac{e_0^2}{\delta a_0} \quad (7)$$

egyenlet értelmében.

A (2) egyenletben az egész térre vonatkozó integrálokat az  $u(r, \delta, \vartheta)$ , ill.  $v(r, \delta, \vartheta, m)$  függvények alakja miatt két részre kell bontanunk. Ennek megfelelően a  $D(r)$  közelítő függvény is két részből állítható össze. Az I. tartományban,  $0 \leq r \leq \delta_I$ ,

$$D_I(r) = \sum_j \alpha_j^I r^{\beta_j^I} e^{-\gamma_j^I r}, \quad (1b)$$

míg a II. tartományban,  $\delta_{II} \leq r \leq \infty$ ,

$$D_{II}(r) = \sum_j \alpha_j^{II} r^{\beta_j^{II}} e^{-\gamma_j^{II} r} \quad (1c)$$

lesz. Az itt szereplő  $\delta_I$  és  $\delta_{II}$  a várható  $\delta_0$  egyensúlyi helyzet körül szimmetrikusan van megválasztva, azonkívül rájuk  $\delta_I > \delta_{II}$  összefüggés érvényes.

A  $D_I(r)$  és  $D_{II}(r)$  sűrűség-függvénynek így módon lehetővé vált felbontása megkönnyíti az esetleg táblázatban megadott sajátfüggvények approximációját.

Ha a (2) képletben szereplő integrandusoknak a magokat összekötő tengelyre való szimmetriáját tekintetbe vesszük és  $\mathcal{P}$  szerint (2. ábra) integrálunk, (1b), (1c), (2), (6) és (7) egyenletek felhasználásával az  $E(\delta)$  disszociációs energia végleges kifejezését kapjuk:

$$E(\delta) = \left[ -\frac{1}{\delta} - \sum_j \left[ \alpha_j^{\text{II}} L^{\text{II}}(\beta_j^{\text{II}} - 1, \gamma_j^{\text{II}}) - \frac{\alpha_j^{\text{II}}}{\delta} L^{\text{II}}(\beta_j^{\text{II}}, \gamma_j^{\text{II}}) \right] - \right. \quad (8)$$

$$\left. \frac{\sum_j \left[ \frac{1}{\delta^2} \sum_{r=1}^m \frac{\alpha_j^{\text{I}}}{(2r+1)\delta^{2r}} L^{\text{I}}(\beta_j^{\text{I}} + 2r, \gamma_j^{\text{I}}) + \alpha_j^{\text{II}} \left( \frac{1}{\delta^2} L^{\text{II}}(\beta_j^{\text{II}}, \gamma_j^{\text{II}}) - \frac{2}{\delta} L^{\text{II}}(\beta_j^{\text{II}} - 1, \gamma_j^{\text{II}}) \right) \right]}{\sum_j \left[ \frac{1}{\delta^2} \sum_{r=1}^m \frac{\alpha_j^{\text{I}} r}{\delta^{2r}} L^{\text{I}}(\beta_j^{\text{I}} + 2(r-1), \gamma_j^{\text{I}}) + \alpha_j^{\text{II}} \sum_{r=0}^m (r+1) \delta^{2r} L^{\text{II}}(\beta_j^{\text{II}} - 2(r+2), \gamma_j^{\text{II}}) \right]} \right. +$$

$$\left. \frac{\sum_{r=0}^m \frac{\delta^{2r}}{2r+1} L^{\text{II}}(\beta_j^{\text{II}} - 2(r+1), \gamma_j^{\text{II}}) \right] - \left[ \sum_j \left( \alpha_j^{\text{II}} L^{\text{II}}(\beta_j^{\text{II}} - 1, \gamma_j^{\text{II}}) - \frac{\alpha_j^{\text{II}}}{\delta} L^{\text{II}}(\beta_j^{\text{II}}, \gamma_j^{\text{II}}) \right) \right]^2 \left\{ \frac{e_0^2}{a_0} \right\}$$

$$+ \frac{\sum_j \left[ \frac{1}{\delta^2} \sum_{r=1}^m \frac{\alpha_j^{\text{I}} r}{\delta^{2r}} L^{\text{I}}(\beta_j^{\text{I}} + 2(r-1), \gamma_j^{\text{I}}) + \alpha_j^{\text{II}} \sum_{r=0}^m (r+1) \delta^{2r} L^{\text{II}}(\beta_j^{\text{II}} - 2(r+2), \gamma_j^{\text{II}}) \right]}{a_0},$$

ahol

$$L^{\text{I}}(a, b) = \frac{a!}{b^{a+1}} - e^{-b\delta} \sum_{\zeta=0}^a \frac{a! \delta^{a-\zeta}}{(a-\zeta)! b^{\zeta+1}} \quad \text{ha } a \geq 0$$

és

$$L^{\text{II}}(a, b) = \begin{cases} e^{-b\delta} \sum_{\zeta=0}^a \frac{a! \delta^{a-\zeta}}{(a-\zeta)! b^{\zeta+1}} & \text{ha } a \geq 0, \\ -\mathcal{E}i(-b\delta) & \text{ha } a = -1, \\ e^{-b\delta} \sum_{\zeta=1}^{|a|-1} (-b)^{\zeta-1} \frac{(|a|-\zeta-1)!}{(|a|-1)! \delta^{|a|-\zeta}} - \frac{b^{|a|-1}}{(|a|-1)!} \mathcal{E}i(-b\delta) & \text{ha } a < -1. \end{cases} \quad (9)$$

ahol  $\mathcal{E}i(-c) = \int_{\infty}^c \frac{e^{-t}}{t} dt$ . A (8) egyenletből kiszámított energia-értékeket az 1. táblázatban foglaltuk

1. táblázat

$\delta$ $a_0$ egysége- ben $E(\delta)$ energia $e_0^2/a_0$ egységeben	1,7	1,8	1,9	2,0	2,2
$E(\delta)$	-0,483 <sub>6</sub>	-0,504 <sub>0</sub>	-0,512 <sub>0</sub>	-0,511 <sub>5</sub>	-0,495 <sub>6</sub>

össze; grafikus ábrázolásuk a 3. ábrán található. A (8) egyenletből az energia-minimumra a következőt kapjuk:

$$E_{\text{theor.}} = E(\delta_0) = -0,514 \frac{e_0^2}{a_0} = -13,98 \text{ eV}$$

az ennek megfelelő magtávolságra pedig

$$\delta_0 = 1,94 a_0 = 1,026 \text{ \AA}$$

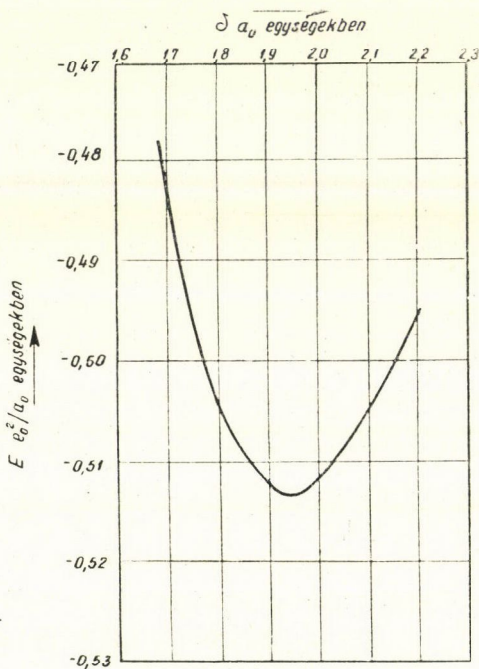


Ily módon meghatároztuk a molekulának  $H^+$  és  $F^-$  ionokra való disszociációjakor fellépő energiáját, mely *R. M. Talley, H. M. Kaylor és A. H. Nielsen* [9] méréseivel egy hipotetikus körfolyamat segítségével összehasonlítható. A kapott empirikus energiaérték a nullponti energia figyelembevételével

$$E_{\text{emp}} = -15,58 \text{ eV.}$$

Az empirikus magtávolság Landolt—Börnstein: Zahlenwerte u. Funktionen stb. [10] szerint

$$\delta_0 \text{ emp} = 0,92 \text{ \AA.}$$



3. ábra

4. §. A  $\nu$  ultravörös sajátfrekvencia kiszámításához szükségünk van az energiának  $\delta$  szerinti második deriváltjára, u. i.:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{E''(\delta)}{M}}. \quad (10)$$

Az itt szereplő  $E''(\delta)$  az 1. táblázatban megadott energiaértékekből könnyen kiszámítható,  $M$  pedig az  $M_1$  proton-, illetve  $M_2$  fluor-aniontömeggel kifejezett redukált tömeget jelenti:

$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}.$$

Az így kiszámított érték  $\nu_{\text{theor}} = 13,24 \cdot 10^{13} \text{ sec}^{-1}$ , míg empirikusan [11]  $12,43 \cdot 10^{13} \text{ sec}^{-1}$  adódik.

5. §. A deformált sajátfüggvény a variációs paraméter értékének meghatározása esetén a (4) egyenletből kiszámítható. A minimumfeltételből a variációs paraméter a következő alakban adódik:

$$\lambda(\delta_0) = U_2(\delta) \left\{ \sum_j \left[ \frac{1}{\delta_0^2} \sum_{v=1}^m \frac{\alpha_j^I}{(2v+1)\delta_0^{2v}} L^I(\beta_j + 2v, \gamma_j^I) + \right. \right. \\ \left. \left. + \alpha_j^{II} \left( \frac{1}{\delta_0^2} L^{II}(\beta_j^{II}, \gamma_j^{II}) - \frac{2}{\delta_0} L^{II}(\beta_j^{II} - 1, \gamma_j^{II}) + \sum_{v=0}^m \frac{\delta_0^{2v}}{2v+1} L^{II}(\beta_j^{II} - 2(v+1), \gamma_j^{II}) \right) \right] - \right. \\ \left. - \left[ \sum_j \left( \alpha_j^{II} L^{II}(\beta_j^{II} - 1, \gamma_j^{II}) - \frac{\alpha_j^{II}}{\delta_0} L^{II}(\beta_j^{II}, \gamma_j^{II}) \right) \right]^2 \right\}^{-1}. \quad (11)$$

A  $\mu$  elektromos dipólus-momentumot a

$$\mu = e_0 a_0 \left( \delta_0 - \sum_{n,l} \int \varphi_{n,l}^* r \cos \vartheta \varphi_{n,l} d\tau \right) \quad (12)$$

összefüggésből határozhatjuk meg.

A jobboldali integrálra a részletes számítás a következő eredményt adja:

$$\sum_{n,l} \int \varphi_{n,l}^* r \cos \vartheta \varphi_{n,l} d\tau = \\ = \frac{2}{3} \lambda \left\{ \sum_j \left[ \frac{1}{\delta_0^2} \alpha_j^I L^I(\beta_j^I + 2, \gamma_j^I) + \delta_0 \alpha_j^{II} L^{II}(\beta_j^{II} - 2, \gamma_j^{II}) \right] \right\}. \quad (13)$$

A (11), (12) és (13) egyenletek felhasználásával a dipólus-momentum

$$\mu_{\text{theor}} = 1,84 \cdot 10^{-18} \text{ c. g. s.}$$

-nek adódik.

A dipólus-momentumra kapott empirikus érték *A. J. Weith*, *M. E. Hobbs* és *P. M. Gross* [12] szerint

$$\mu_{\text{emp}} = 1,91 \cdot 10^{-18} \text{ c. g. s.}$$

Fenti eredményeket a 2. táblázatban foglaltuk össze. A zárójelben lévő számok az empirikus értéktől való százalékos eltérést mutatják.

2. táblázat

	$E(\delta_0)$ disszociációs energia eV egységeken	$\delta_0$ megtávolság Å egységeken	$\nu$ saját- frekvencia sec <sup>-1</sup> egységeken	$\mu$ dipólus- momentum c. g. s egységeken
Elméleti értékek	13,98 (10%)	1,026 (11%)	$13,24 \cdot 10^{13}$ (6%)	$1,84 \cdot 10^{-18}$ (4%)
Tapasztalati értékek	15,58	0,92	$12,43 \cdot 10^{13}$	$1,91 \cdot 10^{-18}$



Az energiában és a többi molekula-állandókban mutatkozó max. 10% eltérés csökkentésére a magasabbrendű perturbációs energiákat is figyelembe vevő számítás van folyamatban.

## IRODALOM

1. Horváth J. I. Acta Phys. Hung. 2, 47, 1952.
2. Gáspár R. és Kónya A. Acta Phys. Hung. 3, 31, 1953.
3. C. R. Müller és H. Eyring Journ. Chem. Phys. 19, 1495, 1951.  
C. R. Müller Journ. Chem. Phys. 19, 1498. 1951.
4. Gombás P. és Neugebauer Th. Zs. f. Phys. 92, 375, 1934.
5. Náray Zs. Acta Phys. Hung. 2, 55, 1952.
6. Gombás P. és Gáspár R. Acta Phys. Hung. 1, 317, 1952.
7. F. W. Brown Phys. Rev. (2) 44, 214, 1933.
8. H. Hellmann Acta Physicochimica USSR 2, 273, 1935.
9. R. M. Talley, H. M. Kaylor és A. H. Nielsen Phys. Rev. 77, 529, 1950.
10. Landolt Börnstein Zahlenwerte und Funktionen usw. I. kötet 2. rész, Molekeln I-  
227 old. Springer Verlag, Berlin, 1951.
11. S. M. Naude és H. Verleger Proc. phys. Soc. London 63A 470. 1950.
12. A. J. Weith, M. E. Hobbs és P. M. Gross Tech. Rep. 70, 805. 1948.

# ÚJ MÓDSZER RELAXÁCIÓS JELENSÉGEK VIZSGÁLATÁRA\*

VALKÓ IVÁN PÉTER és  
Hiradástechnikai Ipari  
Kutató Intézet, Budapest

GERGELY GYÖRGY  
Távközlési Kutató Intézet,  
Budapest

Bonyolult jelenségek és különösen relaxációs jelenségek időbeli lefolyásának vizsgálata általában úgy történik, hogy valamilyen módon előállítanak egy villamos feszültséget, mely a vizsgálandó mennyiséggel arányos, és azt oszcillográfálják. A kapott oszcillogrammot grafikus vagy numerikus analízisnek vetik alá, hogy kiszámítsák, milyen matematikai függvénynek felelt meg a jelenség időbeli lefolyása. Ha például gyors lefolyású fényjelenséget akarnak vizsgálni, akkor a fényt egy fotocella, illetve elektronsokszorozó katódjára viszik és a fotocella vagy elektronsokszorozó munkaellenállásán fellépő feszültséget vizsgálják oszcillográffal.

Ha a jelenség lényegileg egyetlen exponenciális függvénnyel közelíthető meg, akkor kézenfekvő az a gondolat, hogy a mérés maga elektronikus eszközökkel történjék. Erre az esetre több mérési eljárást dolgoztak ki, amelyek közös gondolata az, hogy a szóbanforgó exponenciális időbeli lefolyású jelenséget gyors, szabályos időközökben megismétlik és a katódsugár oszcillográf ernyőjén álló képet állítanak elő. Az oszcillográfban a jelfeszültséget valamilyen módon kombinálják egy másik exponenciális feszültséggel, amelynek időállandóját szabadon lehet állítani és ezt az időállandót addig variálják, amíg valamilyen jellegzetesen egyszerű ábra keletkezik.

1. Az egyik megoldás azt a lehetőséget használja ki, hogy egy erősítő berendezés erősítését elektromos eszközökkel befolyásolni lehet. Legyen a vizsgálandó elektromos jel:

$$V = V_0 e^{-\alpha t},$$

amelyet  $A$  erősítésű erősítőbe vezetünk és az erősítő kimenetén nyert  $V = A \cdot$  feszültséget adjuk az oszcillográf függőleges lemezpárjára.

Ha az erősítés nem állandó, hanem exponenciálisan változik az időben

$$A = a e^{\beta t},$$

a kapott  $V$  feszültség igen különböző alakokat vehet fel:

$$V' = VA.$$

Ez exponenciálisan csökkenő vagy növekvő görbe. Abban a speciális eset-

\* Bemutatta Gyulai Zoltán akadémikus az 1951. november 26-án tartott felolvasó ülésen. Először megjelent angol nyelven: Acta Physica Hungarica I, (1952) 261.



ben, ha  $\alpha = \beta$ , úgy

$$V' = V_0 \alpha,$$

tehát az időtől független állandó, vagyis az oszcillográf ernyőjén vízszintes vonal jelenik meg,

Az erősítés exponenciális változtatása azonban technikailag szigorú feltételt jelent, amely csak akkor valósítható meg könnyen, ha a  $v$  feszültséget nagyfrekvenciával moduláljuk. Ez az eset önként következik be akkor, ha egy terem akusztikai önrezgéseit vizsgáljuk. Valóban a módszer egyetlen ismert gyakorlati alkalmazása éppen ezt a célt szolgálja.<sup>1,2</sup>

2. Előszertettel használják azonban akusztikai méréseknél a mérésnek egy másik megoldását, amelynél az erősítő kimenete arányos a bemenő feszültség logaritmusával.

$$A = a \log V$$

$$V' = a \log V_0 - \alpha t a.$$

A kapott oszcillogramm tehát egyenes lesz, melynek irány tangense adott erősítő berendezésnél az időállandótól függ. A kiértékelésnél azonban szükség van a vízszintes eltérítés hiteles értékére.

3. Lumineszkáló anyagok utánvilágításának meghatározásánál más módszer alkalmazott *Strange* és *Henderson*.<sup>3</sup> Módszerükben legfontosabb szerepe egy különleges katódsugárcsőnek volt, amelybe egy helyett több függőleges lemezpár volt beépítve. Ha az egyik függőleges lemezpárra adott eltérítő feszültséget kompenzáljuk egy ellenkező polaritású megfelelő nagyságú feszültséggel, amit a következő lemezpárra helyezünk, az eredő eltérítés 0 lesz és ha a kompenzálás tökéletes minden időpillanatban, a kapott oszcillogramm egyszerűen vízszintes vonal lesz.

4. Ugyanezzel a problémával foglalkoznak *Tolsztoj* és *Feofilov*,<sup>4</sup> akik rámutatnak arra is, hogy mérési módszerüket nemcsak lumineszkáló anyagok vizsgálatánál, hanem egészen általánosan a fizikának számos területén sikerrel lehet alkalmazni. *Tolsztoj* és *Feofilov* a vizsgáló oszcillográf függőleges lemezpárjára adják a vizsgált mennyiséggel arányos feszültséget, a vízszintes lemezpárra pedig egy beállítható mértékben exponenciálisan csökkenő feszültséget. A kapott oszcillogramm egyenlete:

$$y = x^{\frac{\alpha}{\beta}},$$

aminek egy parabola sereg felel meg. Abban az esetben, ha  $\alpha = \beta$ , a parabola egyenessé fajul, ami az oszcillogrammon könnyen felismerhető.

Ha az ismertetett módszereket összevetjük egymással, azt látjuk, hogy az első és második módszernél nehézséget jelent egy, időben tökéletesen exponenciálisan változó, vagy logaritmikus menetű erősítő szerkesztése. A harmadik és negyedik módszernél viszont külön erősítőn halad át a jel és az őt kompenzáló feszültség és így a helyes működés előfeltétele az, hogy töké-



letesen egyforma erősítők lássák el a különböző lemezpárokat, ami többfokozatú erősítőknél nem mindig valósul meg a megkívánt pontossággal.

A fenti nehézség mellett is alkalmasak elvileg az ismertetett módszerek arra, hogy egyetlen exponenciálisan változó folyamat időállandóját meghatározzuk velük, de a gyakorlatban fellépő legfontosabb problémák éppen komplexebb relaxációs folyamatok, melyek sokszor néhány exponenciális függvény összegével közelíthetők meg. Legyen tehát a jelenséggel arányos feszültség:

$$V = V_1 e^{-\alpha_1 t} + V_2 e^{-\alpha_2 t} + V_3 e^{-\alpha_3 t} + \dots$$

Rögtön látható, hogy az első módszer nem vezethet célhoz. A második esetben egy tört poligont kapunk, amelynek kiértékelése még további nehézségeket okoz.

A harmadik megoldásnál a főnehézséget a rendkívül bonyolult különleges katódsugárcső okozza, mert a katódsugárcsőbe a szokásos két lemezpáron kívül még annyi függőleges lemezpárt kell beépíteni, ahány összetevőre akarjuk felbontani a vizsgálandó függvényt. Technikai okoknál fogva ez két-három összetevőnél határt szab az alkalmazásnak.

A negyedik módszernél elvileg lehetséges ugyan a kiegyenlítés, ha a vízszintes lemezpárra egy:

$$V_x = c V_y$$

feszültséget adunk, de amíg ennek értékét nem találjuk el, a kapott oszcillogramm rosszul tekinthető át és a  $V_x$  feszültség módosításával elért változások annyira bonyolultak, hogy a pontos kiegyenlítés igen nehezen érhető el.

A kérdés komplexum felmerült a Távközlési Kutató Intézet laboratóriumában is, ahol ugyancsak foglalkoztunk lumineszkáló anyagok utánvilágításának vizsgálatával. Sikerült itt egy olyan mérési módszert kidolgozni, amely nagy részben mentes az eddig ismertetett eljárások hibáitól.

### *Mérési elrendezés*

Mérési módszerünk elve az, hogy a vizsgált függvényből levonunk egy exponenciális polinomot. A polinom tagjainak számát és azok értékét addig változtatjuk, amíg a különbség 0 lesz. Az összeadást és kivonást elektronikus úton végezzük.

Összeadásra és kivonásra minden elektromos áramkör alkalmas, amely lineárisnak tekinthető, tehát érvényes rá a szuperpozíció tétele. Az elvileg legegyszerűbb megoldás az lenne, hogy az egyes mennyiségekkel arányos elektromos feszültségeket sorbakapcsolnánk, ez azonban sok kellemetlenséget hoz magával, mivel az egyes feszültségforrások egyik pontja nem lehet közös potenciálon. A feszültségek párhuzamos kapcsolásával elérhető az összeadás, de akkor minden feszültségforrás belső ellenállása befolyásolja az áramot és az egyes feszültségeket különböző súlytényezők figyelembevételével kell összegezni.



Elektroncsövek bevonásával esik ez a nehézség. Az elektroncsöveket külön-külön vezéreljük az egyes összeadandó feszültségekkel, munkaellenállásuk pedig közös, tehát a nagy belsőellenállású csövek egymással és a munkaellenállással vannak párhuzamosan kapcsolva. Ez az eljárás tetszőszerinti hullámformák előállítására ad módot, mert bármilyen periodikus függvény tetszőszerinti sorbafejtését meg tudjuk közelíteni oly módon, hogy a sor egyes tagjait képező elemi függvényeket megfelelő elemi áramkörökkel állítjuk elő. Egy-egy további tag figyelembevétele csupán egy további elektroncső párhuzamos kapcsolását jelenti, ami a többi tagot alig befolyásolja. Ez a befolyás csak a cső véges belsőellenállásának következménye és teljesen független a cső rácsán alkalmazott áramkörtől.

Mivel az elektroncsöves erősítés  $180^\circ$ -os fázisfordítással jár, a szükséges kivonás akkor jön létre, ha a munkaellenálláson fellépő feszültségformát (párhuzamos kapcsolás segítségével) egyszerűen hozzáadjuk a vizsgálandó feszültséghez és az egyes részfeszültségek értékét addig módosítjuk, amíg az eredő feszültség 0 lesz.

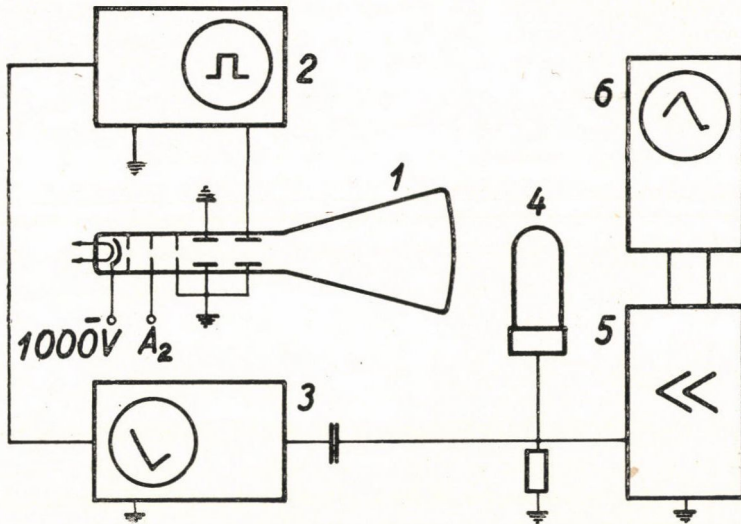
Amennyiben exponenciális függvényeket akarunk összeadni, azokat kézenfekvő módon kondenzátornak ellenálláson keresztül történő feltöltésével, illetve kisütésével állíthatjuk elő.

Bár a módszer egészen általános, fő alkalmazási területe az exponenciális relaxációs jelenségek ábrázolása. A kompenzáló készüléket lumineszkáló anyagok vizsgálatánál alkalmaztuk. Katódsugárral gerjesztett willemit ernyők lumineszkálásának felgerjedését és utánvilágítását vizsgáltuk a kompenzáló eljárással.

Egy előző közleményben<sup>5</sup> leírt mérési elrendezést kiegészítettünk a kompenzáló berendezéssel. Az 1. ábra mutatja a mérés elrendezését. Négy-szöghullámú generátor, vagy impulzus generátor vezérli a katódsugárcsövet, melynek ernyője a vizsgált lumineszkáló anyag. A generátor egyidejűleg vezérli a kompenzáló berendezést.

A vezérlő impulzus az elektronsugarat az ernyő meghatározott pontjára téríti el, melyet az elektronsugár az impulzus időtartama alatt bombáz. Ezen folt fénye elektronsokszorozó fotocella katódjára jut, melynek munkaellenállásán az ernyő pillanatnyi fényintenzitásával arányos feszültség lép fel. A munkaellenálláson fellépő jeleket erősítve és oszcillográffal nézve, az oszcillográf mutatja a lumineszkálás időbeli lefolyását, az ernyő fényének felgerjedését, az elektronsugárral való bombázás alatt, majd az utánvilágítást a gerjesztések közötti szünetekben.

A gerjesztő impulzus, vagy négyszöggel a katódsugárcső vezérlésével egyidejűleg vezérli az elektronikus kompenzáló készüléket, mely megfelelően beállítva az utánvilágítással, vagy a felgerjedés fényintenzitásával arányos elektromos jeleket állít elő. Ezeket a jeleket a multiplier munkaellenállására

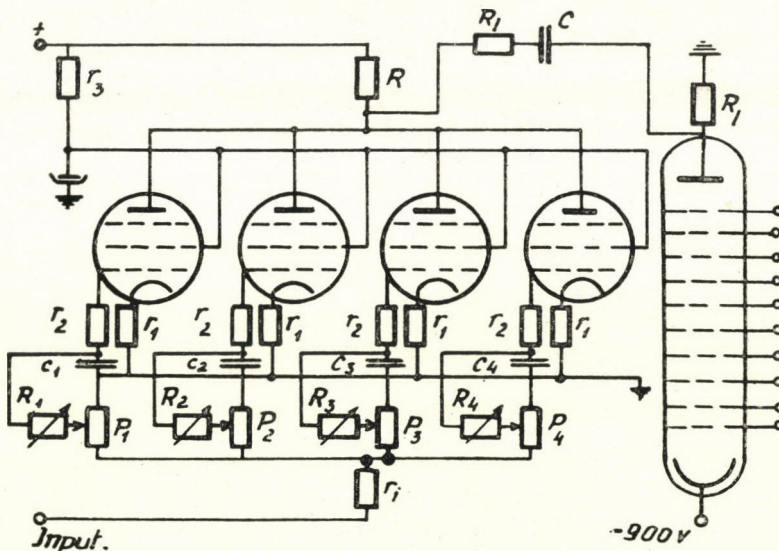


1. ábra. A kísérleti elrendezés vázlatos rajza. Jelölések az ábrán:  
 1. katódsugárcső, 2. négyzetöghullám vagy impulzus generátor, 3. kompenzáló berendezés,  
 4. 931A elektronsokszorozó, 5. erősítő, 6. oszcillográf

víve, kompenzáljuk a fénytől eredő feszültségingadozásokat. Az eredő feszültségingadozásokat erősítve, oszcillográfáljuk.

Helyes kompenzálás esetén az oszcillogramm vízszintes vonal.

A második ábra a kompenzáló berendezés kapcsolási vázlatát mutatja. A vezérlő négyzetöghullám, vagy impulzus feszültséget a  $P_1$  potenciométerre visszük.



2. ábra. A kompenzáló berendezés kapcsolási vázlata



Ezen feszültség egy része a változtatható  $R_1$  ellenálláson keresztül feltölti a  $C_1$  kondenzátort. A következő félperiódusban, vagy impulzus-szünetben  $C_1$  kondenzátor  $R_1$ -en keresztül kisül. Az áramkör időállandója  $R_1$  és  $C_1$  segítségével szabályozható.

A kompenzáló berendezésnél  $R_1$  sokkal nagyobb, mint  $P_1$ , így az  $RC$  tagok időállandóját az állandó  $C$ -k mellett gyakorlatilag az ellenállások beállításával határozzuk meg.

A  $C_1$ -en megjelenő pillanatnyi feszültség vezérli az I. elektroncsövet. A feszültség amplitudóját  $P_1$ -gyel szabályozzuk.

Hasonló a  $P_2$  potenciométer,  $R_2$  ellenállás és  $C_2$  kondenzátor áramköre.  $P_2$  és  $R_2$  függetlenek  $P_1$  és  $R_1$ -től. A többi áramkör is hasonló. Az áramkör száma elvileg nincs korlátozva.

Lényeges, hogy az elektroncsövek erősítése lineáris legyen, ezt kis negatív visszacsatolás alkalmazásával érhetjük el, mellyel az erősítés függetleníthető a csőkarakteristikáktól.

Az exponenciális feszültségek eredő szuperpozíciója lép fel az elektroncsövek közös munkaellenállásán. Ezt a feszültséget nagy kapacitású kondenzátoron keresztül keverjük az elektronsokszorozó munkaellenállásán fellépő feszültséggel. Megfelelően kell megválasztani az ellenállás és kapacitás értékét a torzítások elkerülése végett.

### *Az exponenciális relaxációs jelenségek elmélete*

Az exponenciális (monomolekuláris) relaxációs jelenségek a következő alakú differenciálegyenlettel írhatók le:

$$\frac{df}{dt} = a + bt,$$

ahol  $f$  a relaxációs függvény, ha  $t$  az idő,  $a$  és  $b$  állandók.

Számos folyamat leírható a fenti differenciálegyenlettel.

$V_0$  feszültséget alkalmazva  $R$  ellenálláson keresztül,  $C$  kapacitású kondenzátorra, a kondenzátoron fellépő feszültség a következő differenciálegyenlettel írható le a töltés alatt.

$$CR \frac{dV}{dt} + V = V_0, \quad (1)$$

a kondenzátor kisütése alatt pedig:

$$CR \frac{dV}{dt} + V = 0, \quad (2)$$

megoldva az egyenleteket:

$$V = V_0 \left(1 - e^{-\frac{t}{RC}}\right) \text{ töltés} \quad (3)$$

$$V = V_0 \left(1 - e^{-\frac{T}{RC}}\right) e^{-\frac{t}{RC}} \text{ kisütés,} \quad (4)$$

ahol  $T$  a töltés ideje.

Lumineszkáló anyagok fényintenzitásának időbeli lefolyása hasonló egyenletekkel írható le. A gerjesztés alatt:

$$I = I_0(1 - e^{-\beta t}), \quad (5)$$

az utánvilágítás alatt pedig

$$I = I_0(1 - e^{-\beta T})e^{-\alpha t}, \quad (6)$$

ahol  $\beta$  a felgerjedés,  $\alpha$  pedig a kialvás exponense.

Ha a gerjesztés, vagy a kondenzátor töltésének időtartama  $T$  sokkal nagyobb, mint  $RC$ , vagy  $T \ll \frac{1}{\beta}$  a jelenség eléri az egyensúlyi állapotot.

$V = V_0$  és  $I = I_0$  a gerjesztés folyamán.

Vizsgáljuk meg a fotomultiplier munkaellenállásán fellépő jelek kompenzálásának lehetőségét a kondenzátor töltésével és kisütésével előállított feszültségek segítségével.

Összevetve a (3) és (5), illetve a (4) és (6) egyenleteket, látható, hogy teljesen pontos kompenzálás nem lehetséges, mivel a lumineszkálás felgerjedésének és kialvásának exponensei  $\beta$  és  $\alpha$  különböznek egymástól.

Ha  $I_0 = V_0$  és  $\beta = \frac{1}{RC}$  egyedül a felgerjedés és ha  $\alpha = \frac{1}{RC}$  egyedül az utánvilágítási görbe kompenzálható.

A probléma nehezebb, ha a relaxációs jelenség nem tudja elérni az egyensúlyi állapotot a gerjesztés alatt, vagyis az  $e^{-\beta t}$  tag nem hanyagolható el. Ez az eset áll fenn számos lumineszkáló anyag vizsgálatánál.

A gyakorlatban használatos lumineszkáló anyagoknál  $\alpha$  és  $\beta$  olyan nagyok, hogy  $T = 10$  msec esetén az anyag világítása még távolról sem érte el az egyensúlyi állapotot.  $T$  növelése nem célszerű az erősítő sáv szélessége és alsó frekvenciahatára miatt.

A relaxációs jelenségeket leíró egyenleteket négyyszöghullám és impulzusgerjesztés esetén Williams és Eyring<sup>6</sup> és egy régebbi közleményünkben<sup>5</sup> általános alakban adtuk meg. Kimutattuk, hogy:  $f = e^{-\beta T}$ ,  $g = e^{-\alpha T}$  jelölésekkel a lumineszkálás fényintenzitása az alábbi egyenletekkel írható le

$$I = I_0 \left( 1 - e^{-\beta t} \frac{1-g}{1-fg} \right) \quad (7)$$

a gerjesztés alatt és:

$$I = I_0 \frac{1-f}{1-fg} e^{-\alpha t} \quad (8)$$

az utánvilágítás alatt. Az egyenletekben  $t$ -t a gerjesztés, illetőleg az utánvilágítás kezdetétől kell számítani.

A fény intenzitását a felgerjedés végén és az utánvilágítás kezdetén a következő kifejezés adja:

$$I_e = I_0 \frac{1-f}{1-fg}. \quad (9a)$$

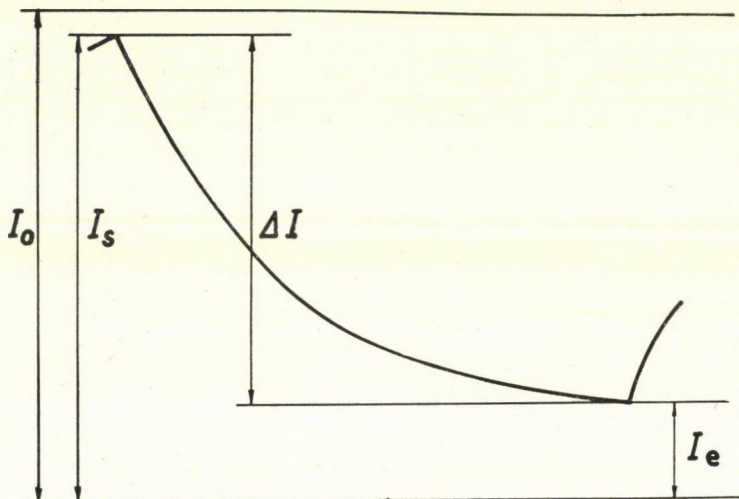


Az oszcillográf ábra amplitudója :

$$\Delta I = I_0 \frac{1-f}{1-fg} (1-g) \quad (9b)$$

(lásd a 3. ábrát).

Az oszcillogrammból csak az  $I$  határozható meg,  $I_e$  azonban nem. Hasonlóképpen  $I_0$  sem határozható meg az egyszerű négyszöghullám módszerrel.



3. ábra. Lumineszkálás utánvilágítási görbéjének oszcillogrammja

Tolsztoj és Feofilov<sup>4</sup> leírtak egy eljárást az ismeretlen paraméterek meghatározására. Ők forgó szektorral szaggatták a fotocella katódjára eső fényt, így meg tudták állapítani az oszcillográfon a zérus fényhez tartozó nívót és  $I_e$ -t.

A négyszöggenerátort kikapcsolva, az elektronsugár ugyanolyan intenzitással bombázza az ernyőt, mint a gerjesztő impulzusok alatt. Az ernyő fényének amplitudója  $I_0$  így meghatározható.

A kondenzátor feszültségét a töltés és kisütés alatt a stacionárius állapotban a következő egyenletekkel írhatjuk le:  $(e^{-\frac{T}{RC}} = \varphi)$

$$V = V_0 \left( 1 - e^{-\frac{t}{RC}} \frac{1-\varphi}{1-\varphi^2} \right) \text{ a töltés alatt} \quad (10)$$

$$V = V_0 \frac{1-\varphi}{1-\varphi^2} \cdot e^{-\frac{t}{RC}} \text{ a kisütés alatt} \quad (11)$$

és

$$V_e = V_0 \frac{1-\varphi}{1-\varphi^2} \quad (12a)$$

$$\Delta V = V_0 \frac{(1-\varphi)^2}{1-\varphi^2} \quad (12b)$$

7, 8 és 9 egyenletekhez hasonlóan.

Természetesen  $V_e$  nem határozható meg, csak egyenáramú mérés segítségével. Ez azonban nem jelent nehézséget, mivel a kondenzátor feszültségének egyenáramú komponense nem érdekel bennünket, csak a kondenzátor feszültségének ingadozásai szükségesek a kompenzáláshoz.

Az elektronsokszorozó munkaellenállásának a feszültségét az utánvilágítás alatt kompenzálva, szükséges, hogy a kompenzáló feszültség és a munkaellenálláson fellépő feszültség különbsége állandó legyen. Ekkor már vízszintes vonalat kapunk az oszcillográfon. Tehát:

$$F = I - V = I_0 \frac{1-f}{1-fg} e^{-\alpha t} - V_0 \frac{1-\varphi}{1-\varphi^2} \cdot e^{-\frac{t}{RC}} = \text{const} \quad (13a)$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} = 0$$

a (13a) egyenletből következik, hogy

$$\alpha = \frac{1}{RC}, \varphi = g = e^{-\alpha t}$$

$$I_0 \frac{1-f}{1-fg} = V_{od} \frac{1-g}{1-g^2}. \quad (14a)$$

A kompenzálás tehát lehetséges. Az egymásnak megfelelő  $I_0$  és  $V_0$  nem egyenlő. Kimutatható, hogy  $F=0$  minden pillanatban.

A fény felgerjedésénél végezve a kompenzálást, az előző jelöléseket használva:

$$F = I - V = I_0 \left( 1 - e^{-\beta t} \frac{1-g}{1-fg} \right) - V_0 \left( 1 - e^{-\frac{t}{RC}} \cdot \frac{1-\varphi}{1-\varphi^2} \right) = \text{const} \quad (13b)$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} = 0$$

$$\beta = \frac{1}{RC}, \varphi = f = e^{-\beta t}$$

$$I_0 \frac{1-g}{1-fg} = V_{or} \frac{1-f}{1-f^2}. \quad (14b)$$

Ebben az esetben a kompenzálásnál csak  $F = \text{állandó}$  érhető el és nem  $F=0$ , mint az utánvilágításnál.

$V_{or}$  és  $V_{od}$  meghatározható az oszcillográf segítségével, ha  $R \rightarrow 0$ . Ekkor az oszcillográf ábra közelítőleg négyszög alakú.

A mérések harmadik fontos módja a rövid impulzus módszer. Ennél a gerjesztési idő  $\tau$  igen rövid, 1—500  $\mu\text{sec}$ , a gerjesztések közötti szünet ugyanakkor elég hosszú ahhoz, hogy a fény közelítőleg elérje a 0 értéket a következő gerjesztés kezdeténél.



Ez utóbbi eset hasonlóan tárgyalható a négyszöghullámú vizsgálatokhoz.

$f = e^{-\beta t}$   
 $g = e^{-\alpha T}$  jelölésekkel, a (7)-es egyenlethez hasonlóan

$$I = I_0 \left( 1 - e^{-\beta t} \frac{1-g}{1-fg} \right). \quad (7a)$$

Méréseinknél  $T = 20$  msec. és  $= 5-500$   $\mu$ sec, így:

$$\frac{1-g}{1-fg} \simeq 0,99-1.$$

A felgerjedés alatt kompenzálva, (13b)-hez hasonlóan

$$F = I - V = I_0(1 - e^{-\beta t}) - V_{or}(1 - e^{-\frac{t}{RC}}) = \text{const.} \quad (13c)$$

$$\frac{\partial F}{\partial t} = 0,$$

$$\beta = \frac{1}{RC}, I_0 = V_{or}. \quad (14c)$$

Az utánvilágítást kompenzálva:

$$F = I - V = I_0(1 - e^{-\beta t})e^{-\alpha t} - V_0(1 - e^{-\frac{t}{RC}})e^{-\frac{t}{RC}} = \text{const.} \quad (13d)$$

$$\alpha = \frac{1}{RC}, I_0(1 - e^{-\beta t}) = V_{od}(1 - e^{-\alpha t}) - I_0 \neq V_{od}. \quad (14d)$$

A fenti számítások csak akkor érvényesek, ha a relaxációs jelenség egyetlen egy exponenciális függvénnyel írható le.

A gyakorlatban, különösen katódsugárenyők vizsgálatánál az ernyő fényének felgerjedése és utánvilágítása csak több exponenciális függvény szuperpozíciójával írható le. Mindegyik exponenciális processzus az emissziós szinkép egyik sávjával van kapcsolatban (7, 8).

### Mérési eredmények

$Zn_2SiO_4-Mn$  ernyőket vizsgálva, azt találtuk, hogy az ernyő lumineszkálásának felgerjedése és utánvilágítása három exponenciális függvény szuperpozíciójával írható le.

A 4. ábra mutatja az ernyő utánvilágítási görbáját négyszöghullámú gerjesztés esetén,  $T = 10$  msec.

Az 5. ábra ábrázolja az egyes kompenzáló komponenseket.

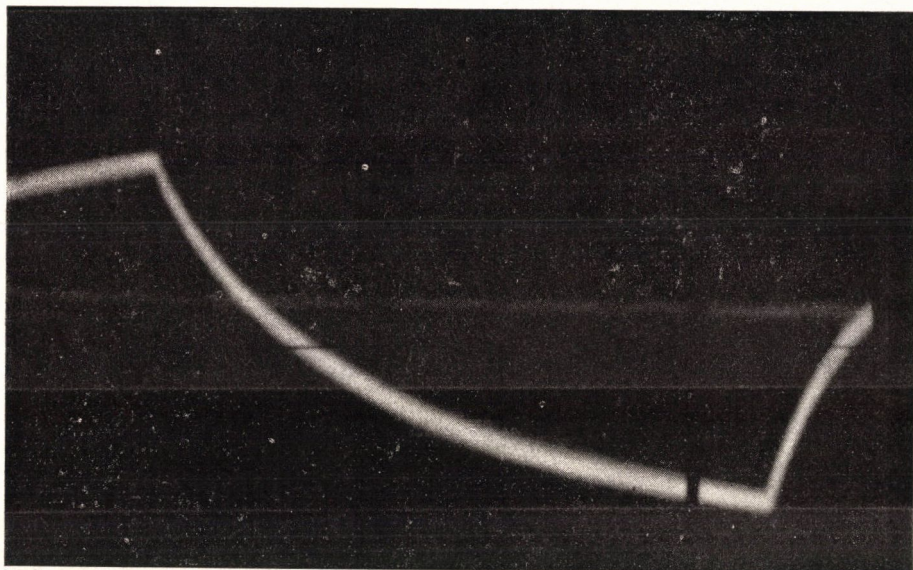
A 6. ábrán a kompenzált utánvilágítási görbe látható.

Hasonló ábrákat találtunk a felgerjedési görbe kompenzálásánál is.

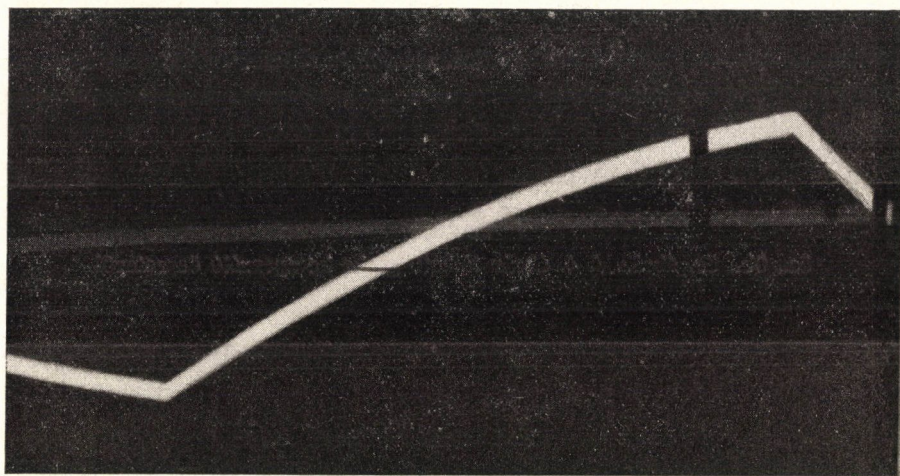
A 7. ábra a nem jó kompenzálás eseteit mutatja.

Hasonló ábrákból kiindulva, az  $RC$  körök időállandóit megfelelően változtatva, a konkáv vagy konvex görbe kiegyenesíthető.





4. ábra. Az utánvilágítási görbe 10 msec. négyszöghullám gerjesztés esetén

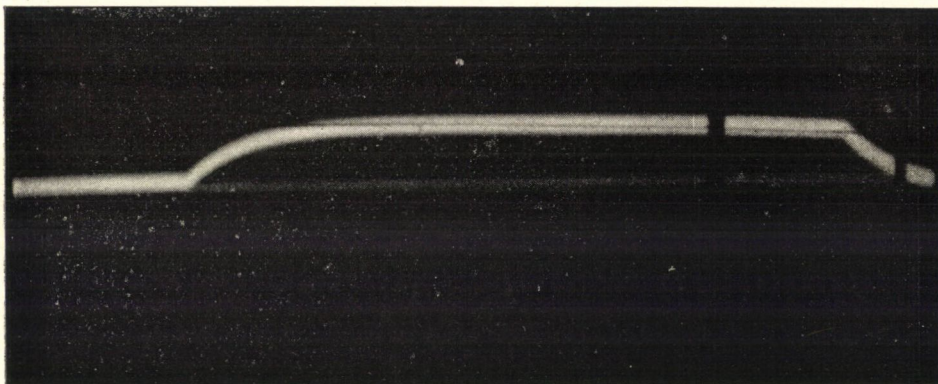


5a ábra

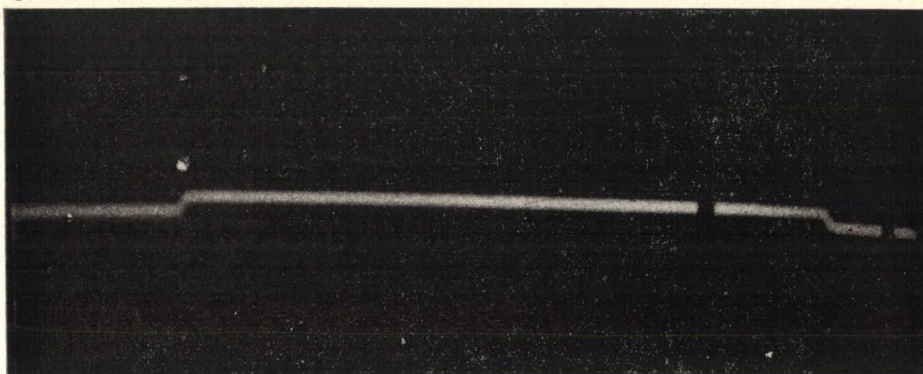
$I_2$  és  $I_3$  kompenzálásának pontossága kisebb, mint az  $I_1$ -é, mivel amplitudójuk és időállandójuk igen kicsi.

Mint azt az (5) közleményben kimutattuk,  $I_2$  és  $I_3$  pontosabb vizsgálata rövidebb gerjesztő impulzusokkal végezhető el. Az  $I_2$  komponenst  $500 \mu\text{sec}$  gerjesztési idővel vizsgáltuk. A 8. ábra az utánvilágítási görbét mutatja  $\tau = 500 \mu\text{sec}$



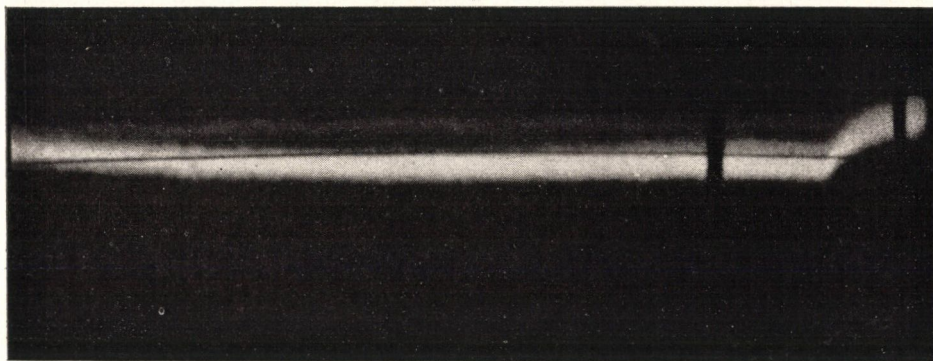


5b ábra



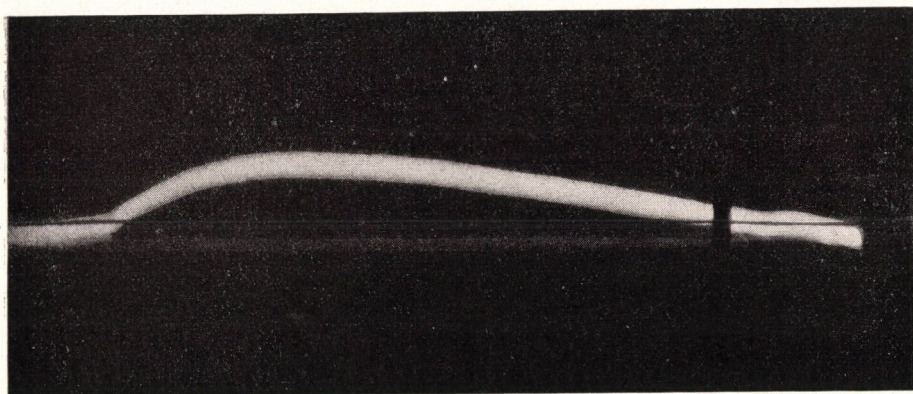
5c ábra

5a., 5b., 5c. ábrák. A 4. ábrán látható görbe kompenzáló összetevői

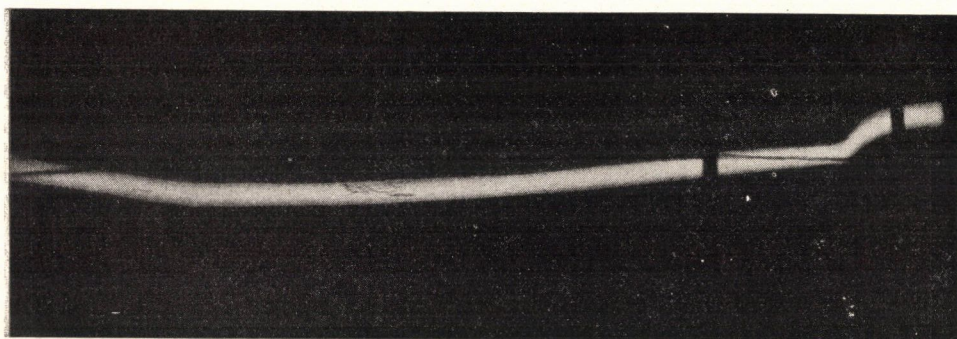


6. ábra. A 4. ábrán látható görbe kikompenzálva



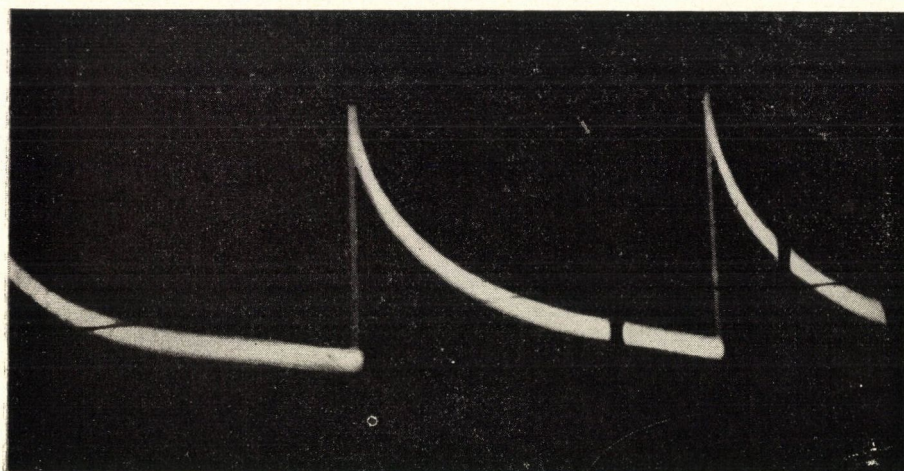


7a ábra



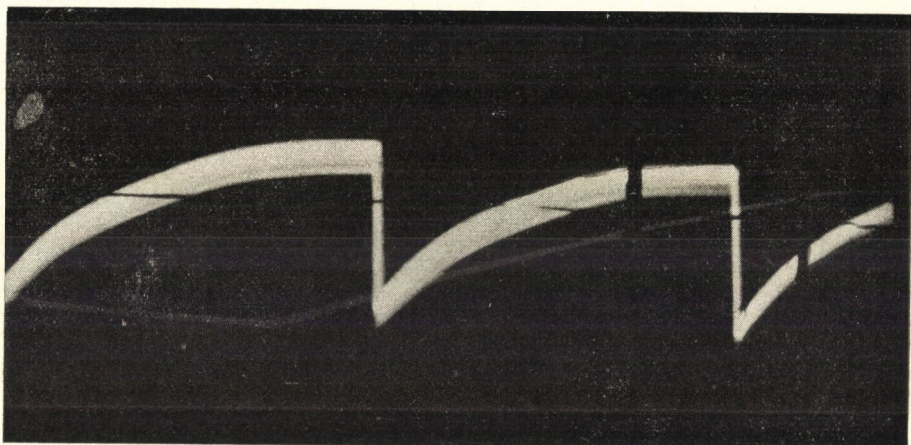
7b ábra

7a., 7b. ábrák. Nem jó kompenzálások. 7a. ábra.  $1/R\tilde{C} > \alpha$ , 7b.  $1/RC < \alpha$

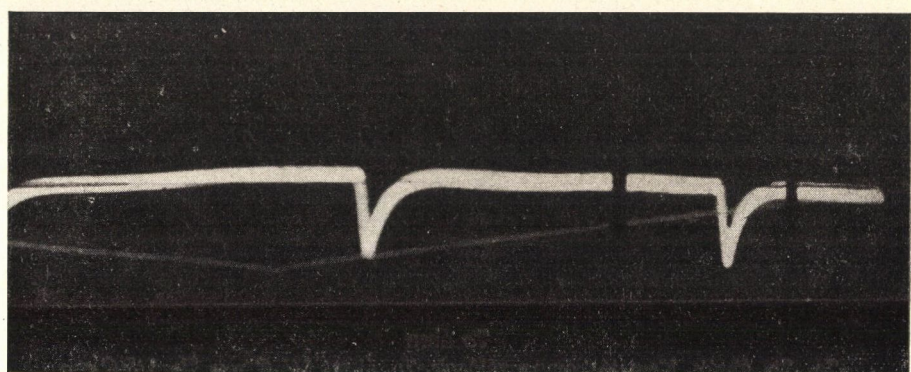


8. ábra. A felgerjedés és utánvilágítás ábrája 500 mikrosec. gerjesztés esetén

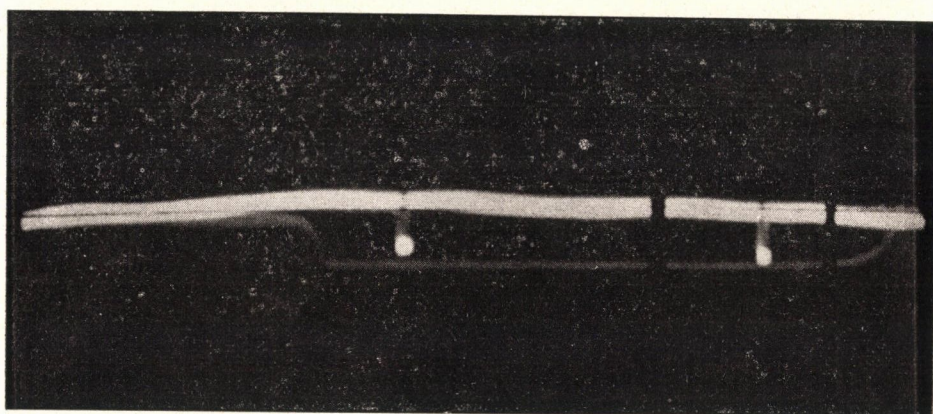




9a ábra



9b ábra



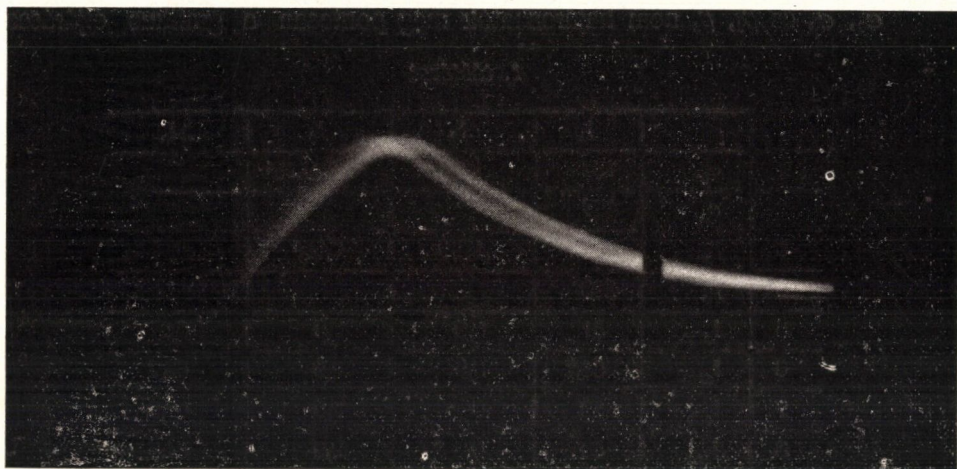
9c ábra

9a., 9b., 9c. ábrák. A 8. ábrán látható utánvilágítási görbe kompenzáló összetevői

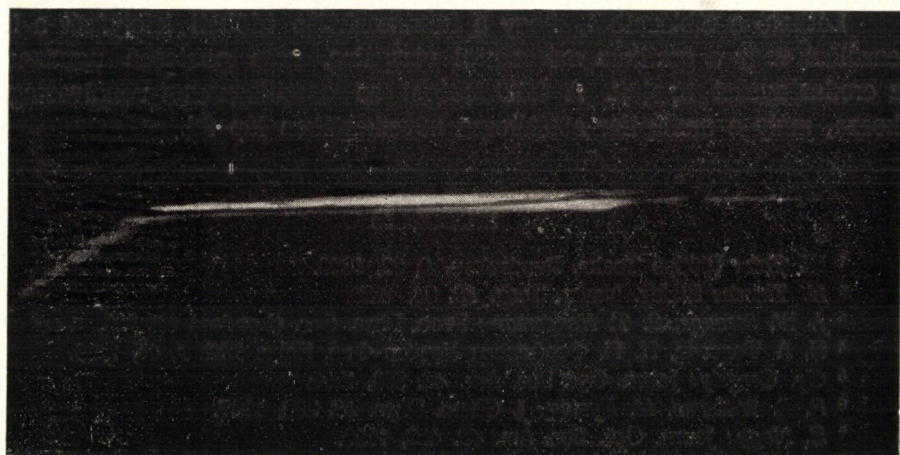


$T = 19,5$  msec. esetén. A 9-es ábrák az egyes kompenzáló komponenseket ábrázolják. Közel ugyanazokat az eredményeket kaptuk  $\alpha_2$  és  $\beta_2$ -re, mint a négyszöghullámú mérésekkel.

$\alpha_3$ -t 5—25 és 50  $\mu$ sec gerjesztő impulzusokkal határoztuk meg. A 10. ábra a felnövekedés és kialvás görbáját mutatja  $= 25 \mu$ sec-re. A 11. ábrán az utánvilágítási görbe látható, ha csak  $I_3$ -t kompenzáljuk.



10. ábra. A felgerjedés és utánvilágítás görbéje 25 mikrosecc. gerjesztési idő esetén



11. ábra, A 10-es ábra utánvilágítási görbéjének  $I_1 + I_2$  komponensei.  
Az  $I_3$  komponens ki van kompenzálva



Az 1. táblázat foglalja össze a mérési eredményeket. Az  $I_1$ ,  $I_2$  és  $I_3$  oszlopok a táblázatban az egyes fénykomponensek adatait tartalmazzák.  $\alpha_m$  és  $\beta_m$  a kompenzációs eljárással meghatározott értékek.  $\alpha_c$  és  $\beta_c$  az 5-ös közleményben leírt grafikus módszerrel meghatározott exponensek.

$I_{adm}$  és  $I_{orm}$  az egyes fénykomponensek amplitúdói, a kompenzációs eljárással meghatározva, a (14a) és (14b) formulák segítségével.  $I_{ode}$  és  $I_{orc}$  a grafikus eljárással kapott értékek.

$\alpha_2$ ,  $\alpha_3$  és  $\beta_2$ ,  $\beta_3$  nem határozhatók meg pontosan a grafikus eljárással.

1. táblázat

		$I_1$	$I_2$	$I_3$	$\Sigma I_k$
1	$\alpha_m$	132	1080	$6,25 \cdot 10^4$	
2	$\alpha_c$	127			
3	$\beta_m$	270	1930	$7,10^4$	
4	$\beta_c$	263			
5	$I_{adm}$	51	8,5	2,5	62
6	$I_{orm}$	54,7	8,5	2,5	65,7
7	$I_{ode}$	52	9	2,5	63,5
8	$I_{orc}$	55	9	2,5	64,5
9	$I_{ok}^{0/0}$	83	13,1	3,9	100
10	$I'_{ok}^{0/0}$	85,5	10,85	3,65	100

A táblázat 9. és 10. sora az egyes komponensek %-os eloszlását mutatja, a négyszöghullámú és az impulzusmérésekből meghatározva (10. sor).

Látható a táblázatból, hogy a lumineszkálás időbeli lefolyását a kompenzációs vagy a grafikus módszerrel vizsgálva, nem pontosan ugyanazokat az eredményeket kapjuk. A különbséget az oscillogramm vonalvastagsága okozza, mely a multiplier sötétárama következtében lép fel.

## IRODALOM

- <sup>1</sup> W. Tak : Philips Techn. Rundschau, 8, 82, 1946.
- <sup>2</sup> H. Thiede : Elektr. Nachr. Tech. 13. 84, 1936.
- <sup>3</sup> J. W. Strange, S. T. Henderson : Proc. Phys. Soc. (London) 58, 369, 1946.
- <sup>4</sup> Н. А. Толстой, П. П. Феофилов : Успехи Физ. Наук. XLI. 1, 44, 1950.
- <sup>5</sup> Gy. Gergely : Journ. Opt. Soc. Am. 40. 353, 1950.
- <sup>6</sup> F. E. Williams, H. Eyring : J. Chem. Phys. 15. 289, 1947.
- <sup>7</sup> E. Nagy : Journ. Opt. Soc. Am. 40. 407, 1950.
- <sup>8</sup> E. Nagy, Gy. Gergely : Acta Phys. Hung. 1. 127, 1951.

# HULLÁMCSOMAG ÁTHALADÁSA POTENCIÁLFALON\*

JÁNOSSY LAJOS, akadémikus  
Központi Fizikai Kutató Intézet, Bpest  
Kozmikus Sugárzási Osztály

Kimutatjuk, hogy egydimenziós hullámcsoport végtelen vékony potenciálfalba való ütközés következtében két részre hasad és megaduk a két rész analitikai kifejezését.

1. §. Síkhullám visszaverődését és áthaladását potenciálfalon már sokszor tárgyalták. A síkhullám viselkedéséből arra lehet következtetni, mi történik véges hullámcsoporttal, hogyha potenciálfalba ütközik: azt kell várnunk, hogy a hullámcsoport két részre, mégpedig visszavert csoportra és átengedett csoportra bomlik. Tudomásunk szerint ezt a folyamatot eddig még nem vizsgálták részleteiben. A kérdés fontossága miatt érdemesnek tartjuk — annak ellenére, hogy igen elemi eljárásról van szó, — hogy részletesen megmutassuk, hogyan megy végbe egy hullámcsoport ilyenszerű felbomlása.

Az egyszerűség kedvéért végtelen magas, de végtelen vékony falat tekintünk. Az ilyen fal egyetlen paramétertől függ és ezért a legegyszerűbb tárgyalást teszi szükségessé.

Tekintsünk tehát egy

$$V(x) = \gamma \delta(x)$$

potenciális energiát; ha a

$$-\frac{1}{2} \psi'' = -\gamma \psi \delta(x) + i \psi \quad (1)$$

Schrödinger-egyenletet az  $x=0$  helytől balra és jobbra elnyúló kis intervallumon belül integráljuk, határfeltételeknek a

$$\begin{aligned} \psi(-0) &= \psi(+0) = \psi(0) \\ \psi'(+0) - \psi'(-0) &= 2\gamma \psi(0) \end{aligned} \quad (2)$$

egyenleteket kapjuk.

Így tehát a kérdés arra a feladatra redukálódik, hogy adott kezdőfeltételhez a szabad részecske-probléma olyan megoldását találjuk, amelynél az első deriváltak az  $x=0$  pontban a (2) egyenlet szerinti szakadása van.

Ilyen megoldásnak okvetlen

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) + A(x) \psi_2(x, t) \quad (3)$$

\* Bemutatta az 1952 június 16-án tartott felolvasó ülésen. Megjelent először angol nyelven: Acta Phys. 2 (1952) 171.



alakúnak kell lennie, ahol

$$A(x) = \begin{cases} 1 & x < 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases}$$

és  $\psi_1(x, t)$  és  $\psi_2(x, t)$  egyaránt megoldásai a szabad részecske-problémának, vagyis

$$-\frac{1}{2} \psi_k''(x, t) = i \dot{\psi}_k(x, t) \quad k = 1, 2, \dots \quad (4)$$

A (3) egyenlet szerint  $x \neq 0$  esetben  $\psi(x, t)$  is megoldása a (3) egyenletnek. Avégett, hogy  $\psi(x, t)$  az  $x=0$  helyen kielégítse a (2) feltételeket, a  $\psi_1(x, t)$  és  $\psi_2(x, t)$  függvényekre vonatkozólag a következő feltételek teljesülését kívánjuk meg:

$$\begin{aligned} \psi_2(0, t) &\equiv 0 \\ \psi_2'(0, t) &\equiv -2\gamma \psi_1(0, t). \end{aligned} \quad (5)$$

Az (5) egyenletből következik, hogy

$$\begin{aligned} \psi_2(x, t) &= \gamma(\Psi(x, t) - \Psi(-x, t)) \\ \psi_1(x, t) &= -\Psi'(x, t), \end{aligned} \quad (6)$$

ahol  $\Psi(x, t)$  a (4) egyenlet tetszőleges megoldása. Így tehát megoldásunk

$$\psi(x, t) = -\Psi'(x, t) + A(x) \gamma(\Psi(x, t) - \Psi(-x, t)). \quad (7)$$

Ilymódon  $\Psi(x, t)$ -t adott kezdeti feltételre meg kell határoznunk. Evégett feltételezzük, hogy kezdetben, vagyis  $t=0$  időpillanatban a  $\psi(x, t)$  egy kezdeti  $x_0 \ll 0$  érték közelében összpontosul. Így tehát  $t=0$  és  $x > 0$  esetében  $\Psi'(x, t) = 0$ , ha tehát feltételezzük, hogy

$$x > 0 \text{ esetében } \Psi(x, 0) = 0, \quad (8)$$

írhatjuk

$$\psi(x, 0) = -\Psi'(x, 0) + \gamma \Psi(x, 0). \quad (9)$$

A (9) egyenlet megoldása

$$\Psi(x, 0) = -e^{\gamma x} \int_{-\infty}^x e^{-\gamma x'} \psi(x', 0) dx'. \quad (10)$$

Ha a (10) megoldást  $x > 0$  értékekre kiterjesztjük, azt találjuk, hogy (8) valóban teljesül.

Tetszőleges  $t > 0$  időpontban

$$\Psi(x, t) = -e^{\gamma x} \int_{-\infty}^x e^{-\gamma x'} \psi(x', t) dx'. \quad (11)$$

(11) ugyanis eleget tesz a (10) határfeltételnek, és a (4) egyenletnek is megoldása. Utóbbi kimutatható a (11) kifejezés kétszeri,  $x$  szerinti differenciálásával; egyszerű számolás eredményeképpen

$$\Psi''(x, t) = -e^{\gamma x} \int_{-\infty}^x e^{-\gamma x'} \psi''(x', t) dx' \quad (12)$$

adódik. Így tehát

$$-\frac{1}{2} \Psi''(x, t) - i\dot{\Psi}(x, t) = -e^{\gamma x} \int_{\alpha}^x e^{-\gamma x'} \left( -\frac{1}{2} \psi''(x', t) - i\dot{\psi}(x', t) \right) dx' \equiv 0.$$

A  $\Psi$  tehát megoldása a (4) egyenletnek, ha  $\psi$  is megoldás.

2. §. A (7) megoldás fizikai jelentése egyszerű.  $\Psi'(x, t)$  egy hullámcsomag, mely keresztülhalad a potenciálfalon, például egy hullámcsomag, mely balról jobbra a potenciálfalon keresztül mozog. Kezdetben ezt a csomagot követi a  $\Psi(x, t)$  csomag, mely ugyanúgy mozog. Amikor azonban  $\Psi'(x, t)$  áthalad a falon, a  $\Psi(x, t)$  tag eltűnik a  $\mathcal{A}(x)$  szorzótényező miatt, így tehát az összetett  $\psi(x, t)$  csomagnak csupán egy része jut át a potenciálfalon.

A potenciálfalon való áthaladás után  $\Psi(-x, t)$  a potenciálfaltól balra válik jelentőssé, minthogy  $\Psi(x, t)$  tükörképe.  $\Psi(x, t)$  a pozitív  $x$ -irányban halad, ezért  $\Psi(-x, t)$  a negatív  $x$ -irányban halad és a részecske visszavert részét képviseli. Így tehát a (7) egyenletben:

$\Psi'(x, t)$  képviseli a részecske áthaladt részét,

$$\gamma \mathcal{A}(x)(\Psi(x, t) - \Psi(-x, t))$$

képviseli a részecske visszavert részét.

3. §. Emlékezzünk vissza arra, hogy a (4) egyenlet egyik jól ismert megoldása

$$\bar{\psi}(x, t) = \frac{\tau^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{1+it}} \exp \left\{ -\frac{(x-x_0-vt)^2}{2(1+it)} + i(x-x_0)v \right\}, \quad (13)$$

vagysis

$$|\bar{\psi}(x, t)|^2 = \frac{\tau^{-\frac{1}{2}}}{\sqrt{1+t^2}} \exp \left\{ -\frac{(x-x_0-vt)^2}{1+t^2} \right\}.$$

Ha  $v \gg 1$ , ez a csomag sokkal szélesebb, mint saját, de Broglie-féle hullámhossza és az  $x$ -tengely mentén  $v$  sebességgel mozog, miközben csak lassan oszlik szét.

Ha a (13) megoldást behelyettesítjük a (11) egyenletbe, egy  $\Psi(x, t)$  függvényre jutunk; ha ezt a függvényt a (7) egyenletbe helyettesítjük be, olyan  $\psi(x, t)$  megoldást kapunk, mely megfelel a részecske mozgásának potenciálfal jelenlétében. Az így kapott  $\psi(x, t)$  pontos megoldása a potenciálfalat tekintetbe vévő Schrödinger-egyenletnek. A  $t=0$  időpontban és még sokáig azután érvényes

$$\psi(x, t) \approx \bar{\psi}(x, t), \quad \text{ha } x \sim x_0$$

és

$$\psi(x, t) \approx \bar{\psi}(x, t) \approx 0, \quad \text{ha } |x-x_0| \gg \sqrt{1+t^2}. \quad (14)$$

Így tehát kezdetben  $\psi(x, t)$  csomagot képvisel, mely nagymértékben hasonló ahhoz, amelyet a (13) egyenlet ad meg és az ütközés után két ellen-



tétes irányban haladó részre bomlik. A  $\Psi(x, t)$  integrál-alakjából azonban nyilvánvaló, hogy a csomag két része nagymértékben hasonló sebességgel oszlik szét, mint amilyen gyorsan a hullámcsomag, mint egész, oszlott szét a felhasadás előtt.

A  $\Psi$  csomag alakja jó megközelítésben a következő eljárással adódik:

A (11) és (13) egyenletekből  $t=0$  esetre,  $x-x_0$  helyett  $\xi-t$  írva, a

$$\Psi(x_0 + \xi, 0) = c e^{\gamma \xi} \int_x^{\xi} \exp \left[ -(\gamma - i\nu) \xi' - \frac{1}{2} \xi'^2 \right] d\xi'$$

kifejezést találjuk. ( $t > 0$  esetében hasonló kifejezés adódik.)

A jobboldalt álló kifejezés írható komplex hibaintegrál alakjában.

Ha a gyorsan konvergáló

$$\int_x^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{e^{-x^2}}{2x} \left( 1 - \frac{a_1}{x^2 + 1} + \frac{a_2}{(x^2 + 1)(x^2 + 2)} - + \dots \right); \quad a_1 = \frac{1}{2}, \quad a_2 = \frac{1}{4}, \dots$$

sorbafejtést használjuk,

$$|\Psi(x_0 + \xi, 0)|^2 = \frac{c^2 e^{-\xi^2}}{(\xi + \gamma)^2 + \nu^2} \left| 1 - \frac{a_1}{(\xi + \gamma - i\nu)^2 + 1} + \dots \right|^2$$

adódik.  $\nu$  nagy értékeire a sorbafejtés első tagja dominál és az abszolút érték-jel előtti tényező a  $\nu$  nem túlságosan nagy értékeire jó megközelítésben megadja a csomag alakját. Az összeg folytonosan változó függvény; így tehát látjuk, hogy a visszavert csomag az eredetihez hasonló; ha speciálisan  $\nu \gg 1$ , akkor az összeg nagyon közel eggyel egyenlő. Hasonlóképpen az átengedett csomag sem lényegesen különböző egy Gauss-alakú csomagtól.

# TANULMÁNYOK A KASZKÁDELMÉLETRŐL\*

Írta :

JÁNOSSY LAJOS

akadémikus

Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

Kozmikus Sugárzási Osztály

## I. RÉSZ

### *Bevezetés*

1. §. A kozmikus sugarak között felfedezett elektron-foton-kaszkádok érdekes típusú stochasztikus folyamatok, és az utóbbi 15 évben sok munkát fordítottak arra, hogy ezeknek a kaszkádoknak az elméletét kidolgozzák. A probléma fizikai oldala viszonylag egyszerű, úgyhogy a felmerült kérdés inkább súlyos matematikai, semmint fizikai probléma. Az alkalmazott módszerek össze vannak foglalva *I. Tamm* és *Sz. Z. Belenykij* könyvében [1], *Rossi* és *Greisen* [3] munkájában, valamint bizonyos mértékig saját könyvemben is [2].

Újabban figyelmet keltett az a tény, hogy elektronfoton-kaszkádokon kívül a nukleon-kaszkádok is fontosak; ezekről az utóbbi kaszkádokról fel kell tételeznünk, hogy kezdetben egyetlen atommag belsejében fejlődnek ki, azután pedig az ilyen kaszkád tagjai a magból való kilépésük után más magokat találhatnak el, ott új kaszkádokat indíthatnak és így komplex folyamat keletkezik.

Ebben a cikkben mindezeknek a kaszkádfolyamatoknak tárgyalására egy általános eljárást szándékozom megadni; ezért valamivel általánosabb kiindulási pontot választok, mint ahogyan azt a legtöbb tárgyalásban tenni szokták. Ezt a módszert több cikkben kifejtettem és közöltem; maguk a módszerek a statisztika elmélet szempontjából nem újak, ami új lehet, az az, hogy megmutatom, hogy ezek a jólismert módszerek egészen közvetlenül alkalmazhatók a komplex kaszkád-problémára.

Ez a cikk következetes formában ismerteti magát a módszert és alkalmazásait, emellett néhány korábban még nem közölt eredményt is tartalmaz.

### *Definíciók*

2. §. A következő típusú stochasztikus folyamatot tárgyaljuk tehát: Egy primér részecske abszorbensre esik és útja közben ütközéseket szenved. Minden egyes ütközés eredményeként maga a primér részecske energiát veszít, és

\* Megjelent először angol nyelven, *Acta Physica*, II, (1952), 289.



szekundéreket kelt. A szekundérek lehetnek ugyanolyan típusúak mint a primér, de nem okvetlenül olyanok. Mindenképpen legalább is néhány szekundér maga is képes ütközésre az abszorbens belsejében, ezáltal terciéreket kelt és így tovább. Felsoroljuk azoknak a kaszkádoknak fő típusait, amelyekről szó van, hogy legyen mihez rögzíteni a fogalmakat.

1. *Elektron-foton-kaszkád.* A primér, mondjuk egy elektron, fotonokat bocsát ki, a fotonok pedig elektronpárokat keltve abszorbeálódnak és így a folyamat folytatódik. Az elektron-foton-kaszkád e fő vonásán kívül az elektronoknak ionizáció, a fotonoknak pedig Compton-effektus következtében való energiavesztését is figyelembe kell venni. Ezek az effektusok a kaszkádnak energiában kevésbé gazdag részében fontosak. Számítás közben természetesen gondot lehet fordítani több más, kisebb jelentőségű effektusra is.

2. *Nukleon-kaszkád.* A primér részecske nukleon; ez egy atommag belsejében ütközik valamely másik nukleonnal, energiát veszít és visszalökött nukleont kelt. Lehet, hogy ütközés közben egy vagy esetleg több mezon is keletkezik. A mezonok kölcsönhatnak a nukleonokkal, bár gyengébben, mint maguk a nukleonok egymás között.

A következőkben nem szorítkozunk valamilyen speciális kaszkád-típusra, hanem a következő modellel foglalkozunk:

Egy  $E$  energiájú részecske  $dx$  úton katasztrofális ütközést szenvedhet, eközben megváltoztatja energiáját és szekundérek is kelt, úgyhogy ütközés után a részecskék (primér és a szekundérek) energiája rendre a következő intervallumban található:

$$E_1, dE_1; E_2, dE_2; \dots; E_k, dE_k.$$

Annak valószínűsége, hogy ez történjék:

$$W_k(E; E_1, E_2, \dots, E_k) dE_1 dE_2 \dots dE_k dx. \quad (1)$$

Különböző multiplicitású ütközések fordulhatnak elő egy kaszkádban, úgyhogy a  $W_k$ -kat különböző  $k$  értékekre kell megadni. Megjegyezzük, hogy  $W_1(E; E_1)$  olyan ütközésre vonatkozik, amelyben a primér részecske energiája  $E$ -ről  $E_1$ -re csökken, anélkül, hogy szekundér keletkeznék. Az ilyen ütközés nem járul hozzá a kaszkád kifejlődéséhez és külön kell kezelnünk. Néha használunk egy  $W_0(E)$  valószínűséget is, olyan folyamatot jelölve ezzel, amelyben a primér eltűnik, anélkül, hogy szekundéreket keltene.

A fenti kifejezés csak egytípusú részecskék kaszkádjaira vonatkozik. A valószínűségfüggvény azonban könnyen általánosítható több mint egy fajtájú részecskék kaszkádjaira is. Ilyen esetben a  $W$  függvény függ a primér típusától, de a szekundér típusától is. Tehát ilyen függvényünk van:

$$W_k(E; E_1, E_2, \dots, E_k; t; t_1, t_2, \dots, t_k) dE_1 dE_2 \dots dE_k dx \quad (2)$$

ez a valószínűsége annak, hogy  $E$  energiájú és  $t$  típusú primér  $dx$  úton  $E_1$ , stb. energiájú,  $t_1$  stb. típusú szekundérek kelt. A  $t$ -k a kaszkádban előforduló



részecskék  $N$  különböző típusának megfelelően diszkrét  $t = 1, 2, \dots, N$  értékeket vehetnek fel. (Pl. az elektron-foton-kaskádban  $t = 1$  feleltethető meg az elektronoknak,  $t = 2$  pedig a fotonoknak.)

Bizonyos esetekben az energia hirtelen változásához vezető katasztrofális ütközések mellett figyelembe kell vennünk folytonos energiavesztéseket is, amelyet mondjuk a következő egyenlet jellemez:

$$\frac{dE}{dx} = -O(E, t), \quad t = 1, 2, \dots, N, \quad (3)$$

ahol a  $t$  változó azt mutatja, hogy a veszteség a kaskádban előforduló részecskék különböző típusainál különböző lehet. A (3) típusú veszteség természetesen mindig belefoglalható az (1) valószínűségi kifejezésbe, evégett csak  $W_1$  számszerű értékét kell nagyon kis veszteségekre nagyon nagynak választanunk, ez az eljárás azonban gyakran kényelmetlen, úgyhogy a számítás folyamán könnyebb megkülönböztetést tenni (1) és (3) típusú folyamatok között.

E cikk első részében feltesszük, hogy a szekunderek ugyanolyan irányban mennek tovább, mint amilyenben a primér haladt, feltesszük tehát, hogy a kaskád egydimenziós folyamat; később majd a szélességben való kiterjedés problémájával is foglalkozunk.

3. §. Ami a  $W$  függvényeket illeti, feltehető, hogy a szekunderek egyike maga a primér. Leírás szempontjából néha egyszerűbb az ütközést úgy tárgyalni, mintha a primér eltűnt volna és teljesen új részecskéket keltett volna. Mi azonban nem használjuk a leírásnak ezt a módját, hanem mindig feltesszük, hogy  $E_1$  a primér részecske lecsökkent energiája,  $E_2$  az „első” szekundér energiája,  $E_3$  a „másodiké” és így tovább. Fizikai szempontból ez a megkülönböztetés fikatív lehet, amikor azonban fel akarjuk írni a helyes diffúziós egyenleteket, nehézségekbe ütközünk, ha számítás közben a részecskéket nem tekintjük individuumoknak. Az a tény, hogy a részecskék fizikailag megkülönböztethetetlenek, azzal van figyelembe véve, hogy a  $W_k$  függvény az  $E_l$ ,  $l = 1, 2, \dots, k$  változók szimmetrikus függvénye. Eszerint tehát annak a valószínűsége, hogy a  $k$  számú részecske közül az egyik  $E_1$ , egy másik  $E_2$  és így tovább közelében legyen, felfogásunknak megfelelően

$$\sum_{(k)} W_k(E; E_1, E_2, \dots, E_k) = k! W_k(E; E_1, E_2, \dots, E_k),$$

ahol  $\sum_{(k)}$  összegezést jelent az  $E_1, E_2, \dots, E_k$  energiák összes permutációira.

Egyszerűség kedvéért a következőkben vektor-jelölést használunk, tehát  $E_1, E_2, \dots, E_k$  jelölésére azt írjuk, hogy  $\mathbf{E}^k$ , és  $t_1, t_2, \dots, t_k$  jelölésére azt, hogy  $\mathbf{t}^k$ . Hasonlóképpen használjuk az

$${}^l\mathbf{E}^m \text{ jelet az } E_{l+1}, E_{l+2}, \dots, E_m \text{ jelölésére,}$$

és a

$${}^l\mathbf{t}^m \text{ jelet a } t_{l+1}, t_{l+2}, \dots, t_m \text{ jelölésére.}$$



Ezt a jelölésmódot más mennyiségek esetében is hasonló módon használjuk. Bevezetjük továbbá a következő jelöléseket:

$$dE_1 dE_2 \dots dE_k = d\mathbf{E}^k$$

és

$$dE_{l+1} dE_{l+2} \dots dE_m = d^l \mathbf{E}^m.$$

Mivel az  $\mathbf{E}^k$  és  $\mathbf{t}^k$  vektor mindig együtt fordul elő, jelölhetjük őket egyetlen szimbolummal, azaz írhatunk:

$$\mathbf{F}^k\text{-t az } \mathbf{E}^k, \mathbf{t}^k \text{ jelölésére,}$$

és egy részecske esetében írhatunk  $F_l$ -et, jelölve ezzel egy  $t_l$  típusú,  $E_l$  energiájú részecskét.

Integrálás a  $d\mathbf{F}^k$  differenciál szerint integrálást jelent  $d\mathbf{E}^k$  szerint és ezenfelül összegezést  $\mathbf{t}^k$  összes lehetséges értékére. Felhasználva ezt a jelölésmódot, a (2) kifejezés helyett azt fogjuk írni, hogy

$$W_k(F; \mathbf{F}^k) d\mathbf{F}^k dx \quad (2a)$$

és (3) helyett azt, hogy

$$\frac{dF}{dx} = -O(F), \quad (3a)$$

továbbá

$$\int_{\mathbf{F}^k} a(\mathbf{F}^k) d\mathbf{F}^k = \sum_{t_1=1}^N \sum_{t_2=1}^N \dots \sum_{t_k=1}^N \int_0^\infty \dots \int_0^\infty a(\mathbf{F}^k) dE_1 dE_2 \dots dE_k.$$

### Eloszlásfüggvények

4. §. A kaszkádfolyamatokat a következő valószínűség-eloszlásfüggvénnyel írhatjuk le:

$$\Phi(E, t; \mathbf{E}^k, \mathbf{t}^k; x) \text{ vagy } \Phi(F; \mathbf{F}^k; x), \quad (4)$$

ahol (4) a valószínűsége annak, hogy a következő folyamat megy végbe:  $E$  energiájú,  $t$  típusú primér olyan kaszkádot indított meg, amely  $x$  távolság befutása után pontosan  $k$  részecskéből áll; az első részecske  $t_1$  típusú, energiája  $> E_1$ , a második  $t_2$  típusú, energiája  $> E_2, \dots$ , az utolsó  $t_k$  típusú, energiája  $> E_k$ .

Az energiaváltozók, minden lehetséges számára megadott  $\Phi$  függvények teljesen leírják a kaszkádfolyamatot. Hasznos azonban egy ennél még általánosabb eloszlást bevezetni. Évéggett tekintsünk  $k$  számú energiaintervallumot, ezek mindegyike feleljen meg egy bizonyos típusú részecskének:

$$\left. \begin{matrix} s_1, s_2, \dots, s_k \\ t_1, t_2, \dots, t_k \end{matrix} \right\}, \text{ jelölésük: } s^k.$$

Ezeknek az intervallumoknak nem kell kapcsolódniuk egymáshoz, szabad fedniük vagy nem fedniük egymást; nem kell, hogy a  $t$ -k mind különbözőek

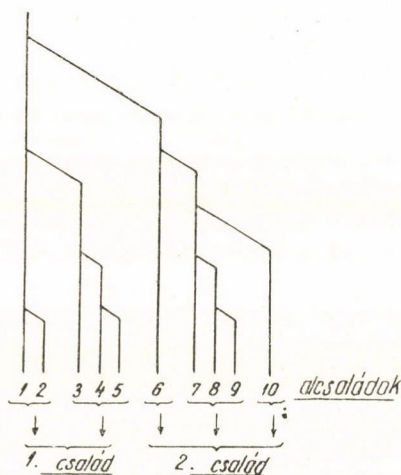
legyenek és nem kell, hogy valamennyi lehetséges részecskefajtát képviseljenek. Mint az előbb,

$$\left. \begin{matrix} s_{l+1}, s_{l+2}, \dots, s_m \\ t_{l+1}, t_{l+2}, \dots, t_m \end{matrix} \right\} \text{-et } \mathbf{s}^m \text{-mel} \quad (m > l)$$

fogjuk jelölni. A  $\Phi$  általánosított értelmezése tehát:

$$\Phi(F; \mathbf{s}^k, x). \quad (4a)$$

E mennyiség kifejezi annak valószínűségét, hogy egy  $F$  primér, — azaz egy  $t$  típusú,  $E$  energiájú részecske — olyan kaskádöt indít, amely  $x$  mélységben éppen  $k$  részecskéből áll; az első részecske  $t_1$  típusú és az  $s_1$  intervallumon belül található, a második részecske  $t_2$  típusú és az  $s_2$  intervallumban van, ..., a  $k$ -ik részecske  $t_k$  típusú és az  $s_k$  intervallumban van.



1. ábra. A zápor kifejlődésének szkémája (egyetlen szekundért eredményező ütközések esetében).

A (4) egyenlet speciális esete (4a)-nak. A (4) kifejezést (4a)-ból akkor kapjuk meg, ha az  $s_k$ -k a következő  $k$  intervallumból állnak:

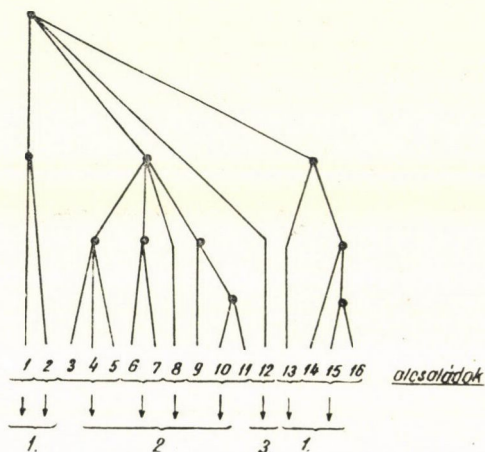
$$s_1 = (E_1, \infty) \quad s_2 = (E_2, \infty), \dots, s_k = (E_k, \infty).$$

5. §. Az ilyen módon értelmezett  $\Phi$  függvény kifejezetten felhasználja azt, hogy a részecskék valamilyen sorszámokkal vannak ellátva. Teljesen lényegtelen, hogy miféle számozást használunk, azonban valamilyen számozást be kell vezetnünk és ehhez azután ragaszkodnunk kell, hogy a számítások során elkerüljük a többértelműségeket. Alább a következő, az 1. és 2. ábrával megvilágított számozást fogadjuk el: azokat a részecskéket, amelyeket egy megadott kaskádban, meghatározott  $x$  mélységben találunk, keletkezésük „családfájának” felhasználásával számozzuk meg.

Az 1. számot viselő részecske a primér; minden ütközése után az a részecske a primér, amelyik a  $W_k(F; \mathbf{F}^k)$  kifejezésben az  $\mathbf{F}^k$  vektor első



komponensének felel meg. A  $W_k$  függvény a  $k+1$  számú diszkrét  $t; t_1, t_2, \dots, t_k$  változónak és a  $k+1$  folytonos  $E; E_1, E_2, \dots, E_k$  változónak a függvénye.  $W_k$  értékei  $t \neq t_1$  esetében — a primérre vonatkozó definíciónk szerint — olyan ütközésnek felelnek meg, amelyben a primér típusa  $t$ -ről  $t_1$ -re változik meg. A primér részecske típusváltozással egybekötött ütközését fel kell tételeznünk például párképződés esetében, ahol a foton-primér két elektront kelt, de foton nem marad. Számozás céljából ilyenkor az elektronpár egyik tagját kell primérként megjelölni.



2. ábra. A zápor kifejlődésének skémája (több szekundért keltő ütközések esetében).

Ha a kaszkád több mint egy részecskét tartalmaz, akkor a számozást tovább kell folytatnunk. Evégett a kaszkádrészecskéket „családokra“ osztjuk, azok szerint a szekundérek szerint, amelyek a primérnek első, egynél nagyobb multiplicitású ütközésekor keletkeztek. Tegyük fel, hogy ez az ütközés  $k > 1$  részecskét keltett; e  $k$  részecske mindegyike (a primért is beleértve) egy-egy szekundér kaszkád primérjének tekinthető. Tegyük fel mármost, hogy a primér családja  $n_1$  számú részecskét tartalmaz, az első szekundéré  $n_2$ -t, ..., az utolsó szekundéré  $n_k$ -t. A primért akkor az 1. sorszámmal látjuk el, fenntartva a 2-től  $n_1$ -ig terjedő sorszámokat az első család többi részecskéjének. Hasonló módon az  $n_1 + 1$  számot adjuk az első szekundérnek, és fenntartjuk az  $n_1 + 2$ -től  $n_2$ -ig terjedő számokat a második család megmaradt tagjainak. És így tovább. Azok a családok, melyek csak egy részecskét tartalmaznak, ezzel teljesen meg vannak számozva. A megmaradó sorszámok szétosztására megismételjük ezt az eljárást többször is. Tegyük fel például, hogy az első család több részecskét tartalmaz. Akkor magát ezt a családot teljes kaszkádnak fogjuk fel, alcsaládokra osztjuk és minden egyes alcsalád első tagját megszámozzuk. Azokat az alcsaládokat, amelyek több részecskét tartalmaznak, ismét fel kell osztani, és az egész eljárást addig folytatni, ameddig csupán egyetlen részecskéből álló

családok nem maradnak. Ezt a látszólag bonyolult számozási eljárást illusztrálja az 1. és 2. ábra.

Az így előírt számozás a kaskádokat egyértelműen osztályozza. A különböző családok, alc családok, stb. a kaskádot valóban minőségileg különböző módon való kifejlődésüknek megfelelően jellemzik, a számozás bonyolultsága a jelenség sokrétűségének következménye.

Bár az itt bevezetett  $\Phi$  függvények egymás után lépésről-lépésre meghatározhatók (lásd a 8. §-t), a bennük szereplő nagyszámú változó miatt teljesen reménytelen feladat volna táblázatba foglalni őket, sőt ha sikerülne is ilyen táblázat elkészítése, — enciklopedia formájában —, teljesen megemésztethetetlen anyagot tartalmazna és így teljesen érdektelen volna. Azok a mennyiségek, amelyek fizikai szempontból érdekesek, az ilyen függvényekből felépített bizonyos átlagok és nyomatékok.

*A kaskádemélet problémája először is olyan nyomatékok kiválogatása az adott eloszlásokból, amelyek valóban érdekesek, másodszor pedig az így kiválasztott nyomatékok kiszámítására olyan módszerek kidolgozása, amelyek lehetőleg kevés számolási munkával járnak és amelyek semmi esetre sem teszik szükségessé maguknak az eloszlásoknak explicit kiszámítását.*

### Diffúziós egyenletek

#### a) Egyrészcse-eloszlás.

6. §. A következőkben explicit kifejezéseket vezetünk le a  $\Phi$ -kre. Kiindulva az egyrészcse-kaskádokból és folytatva a két-, három-, stb. részcse-kaskádokkal, ezek a kifejezések lépésről-lépésre egymásután kiszámíthatók. Először a  $\Phi(F; s'; x)$ -re vezetünk le diffúziós egyenletet, azaz annak valószínűségére, hogy  $x$  úton nem keletkeznek szekundérek, de a primér energiája  $x$  mélységben az  $s_1$  intervallumban található és típusa  $t_1$ .

A primérenergia változásának mértékét megadja a (3) egyenlet, ha csak folytonos veszteségeket veszünk számításba. Egy pillanatra zárjunk ki olyan katasztrofális ütközéseket, amelyek szekundérek nem keltenek, azaz legyen  $W_1(F, F') = 0$ . Feltéve tehát, hogy katasztrofális ütközés nem történt, a primér energiája  $x$  mélységben  $F(x)$ , ahol

$$x = \int_{F(x)}^F \frac{dE'}{O(E', t)}. \quad (5)$$

Ha a  $(0, x)$  intervallumban nem volt katasztrofális ütközés, akkor a primér energiája szükségképpen  $F(x)$ , ezért írhatjuk:

$$\Phi(F; s^1; x) = A(F(x); s^1) \varphi(F, x), \quad (6)$$

ahol

$$A(F'; s^1) = \begin{cases} 1, & \text{ha } E' \text{ az } s_1\text{-ben van és } t = t', \\ 0 & \text{egyébként,} \end{cases}$$



$q(F, x)$  pedig annak a valószínűsége, hogy katasztrofális ütközés nem történt. Annak valószínűsége, hogy az első ilyen ütközés az  $x, x+dx$  intervallumban volt:

$$\alpha(F(x)) q(F, x) dx, \quad (7)$$

ahol

$$\alpha(F') = \sum_{k \geq 0} \int_{\mathbf{F}^k} W_k(F'; \mathbf{F}^k) d\mathbf{F}^k. \quad (7a)$$

Explicit alakban írva:

$$\alpha(E', t') = \sum_k \sum_{t, t_2, \dots, t_k=1}^N \int_{\mathbf{E}^k} W_k(E', t'; \mathbf{E}^k, t^k) d\mathbf{E}^k.$$

(7) segítségével tehát:

$$\frac{\partial q(F, x)}{\partial x} = -\alpha(F(x)) q(F, x)$$

és

$$q(F, x) = \exp \left\{ - \int_0^x \alpha(F(x')) dx' \right\} \quad (8)$$

Így

$$\Phi(F; \mathbf{s}^1; x) = A(F(x); \mathbf{s}^1) \exp \left\{ - \int_0^x \alpha(F(x')) dx' \right\}. \quad (8a)$$

Az  $O(\mathbf{F})=0$  különleges esetben, amikor az energiavesztés csak katasztrofális,  $F(x)=F$ , és így

$$\Phi(F; \mathbf{s}^1; x) = A(F, \mathbf{s}_1) \exp \{ -\alpha(F)x \}. \quad (9)$$

A  $\Phi(F; \mathbf{s}^1; x)$ -re szóló kifejezés bonyolultabb lesz, ha megengedünk olyan katasztrofális ütközéseket is, amelyek nem vezetnek szekundárok keletkezésére ( $k=1$  a (2) egyenletben); ezzel a problémával most fogunk foglalkozni.

7. §. Szekundárkeletkezés nélküli katasztrofális ütközéseket véve figyelembe, a primérenergiára a következőképpen kapunk diffúziós egyenletet:

$$q(F, \xi) W_1(F(\xi); \mathbf{F}^1) d\mathbf{F}^1 d\xi$$

a valószínűsége annak, hogy az első ütközés a  $\xi, \xi+d\xi$  intervallumban történjék és (a típust is beleértve) az  $\mathbf{F}^1, \mathbf{F}^1+d\mathbf{F}^1$  intervallumban levő végső energiára vezessen. Hogy megkapjuk egy olyan állapot valószínűségét, ahol a végső energia az  $s_1$  intervallumba ( $t_1$  típusba) tartozik, össze kell adnunk mindazoknak az (egymást kizáró) folyamatoknak valószínűségét, amelyek a meghatározott végső állapothoz vezetnek. Evégett össze kell adnunk mindazoknak a folyamatoknak valószínűségét, amelyekben az első ütközés különböző  $d\xi$  intervallumokban történt, továbbá minden  $d\xi$ -re össze kell adnunk mindazoknak az eseteknek valószínűségét, amelyekben a közbeeső energia különböző közbeeső  $dF'$  intervallumokba esett, végül mindehhez hozzá kell

adnunk az *ütközés nélkül* történő átmenet valószínűségét. Azt kapjuk tehát, hogy

$$\begin{aligned} \Phi(F; \mathbf{s}^1; x) &= q(F, x) A(F(x); \mathbf{s}^1) + \\ &+ \int_0^x \int_{F'} q(F, \xi) W_1(F(\xi), F') \Phi(F'; \mathbf{s}^1; x - \xi) d\xi dF'. \end{aligned} \quad (10)$$

Az  $F'$ -re vonatkozó integrációban benne foglaltatik a  $t$   $N$  számú különböző értékére vonatkozó összegezés is.

A fenti egyenletből  $\Phi(F; \mathbf{s}^1; x)$  numerikus integráció segítségével meghatározható. Valóban, először is feljegyezzük, hogy  $\Phi(F; \mathbf{s}^1; 0) = A(F; \mathbf{s}^1)$ . Tegyük fel továbbá, hogy  $\Phi(F; \mathbf{s}^1; x')$  már numerikusan ismeretes a  $0 \leq E \leq E'$ -ra és  $t$  összes értékeire a  $0 \leq x' \leq x$  mélységekből, akkor  $\Phi(F; \mathbf{s}^1; x+h)$ -t meghatározhatjuk (10)-ből  $h^2$  nagyságrendű hibával, ha az integrál alá a

$$\Phi(F'; \mathbf{s}^1; x) \approx \Phi(F'; \mathbf{s}^1; x) \quad (x+h \geq x' \geq x)$$

közelítő értéket írjuk. Elég rövid lépéseket használva  $\Phi$ -t  $x$ -nek és  $F$ -nek minden értékére meghatározhatjuk.

A (10) egyenlet valamivel kényelmesebb alakra írható át, ha feltesszük, hogy

$$\begin{aligned} O(F) &= O(E, t_k) = \beta = \text{const.} \\ \beta &= \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k. \end{aligned} \quad (11)$$

Ebben az esetben

$$F(x) = F - \beta_F x,$$

ahol  $F = E, t$  és  $\beta_F$  a  $t$  típusú részecskék folytonos energiaveszteségének mértéke. A fenti egyenlet tehát  $N$  számú egyenlet helyett áll, a  $t$  és így a  $\beta_F$   $N$  különböző lehetséges értékének megfelelően.

Továbbá

$$q(F, \xi) = a(F - \beta_F x) a(F),$$

ahol

$$a(F') = \exp \left\{ \frac{1}{\beta_{F'}} \int_0^{E'} a(E'', t') dE'' \right\}, \quad (c \text{ tetszőleges}),$$

$t'$  az a részecsketípus, amely  $F' = E', t'$ -höz tartozik. Ha most a (10) egyenletet megszorozzuk  $a(F)$ -fel, akkor

$$\begin{aligned} a(F) \Phi(F; \mathbf{s}^1; x) &= a(F - \beta_F x) A(F - \beta_F x; \mathbf{s}^1) + \\ &+ \int_0^x \int_{F'} a(F - \beta_F \xi) W_1(F - \beta_F \xi, F') \Phi(F'; \mathbf{s}^1; x - \xi) d\xi dF'. \end{aligned} \quad (12)$$

Figyelembe vesszük a következő azonosságokat:

$$\left( \frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} \right) A(F - \beta_F x) = 0$$



és

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F}\right) \int_0^x A(F - \beta_F \xi) B(x - \xi) d\xi = A(F) B(x),$$

ahol  $A$  és  $B$  elég síma lefutású függvények. Alkalmazva tehát a

$$\frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F}$$

operátort (12) mindkét oldalára, az eredmény:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F}\right) a(F) \Phi(F; \mathbf{s}^1; x) = \int_{F'} \alpha(F) W_1(F, F') \Phi(F'; \mathbf{s}^1; x) dF'$$

az  $a(F)$  és  $\alpha(F)$  definíciója szerint

$$\beta_F \frac{\partial \alpha(F)}{\partial F} = \alpha(F) a(F).$$

A fenti egyenletet  $a(F)$ -fel osztva azt találjuk tehát, hogy

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} + \alpha(F)\right) \Phi(F; \mathbf{s}^1; x) = \int_{F'} W_1(F; F') \Phi(F'; \mathbf{s}^1; x) dF'. \quad (13)$$

A (13) egyenlet valamivel egyszerűbb, mint (10).

Megjegyezzük (mint előbb egy hasonló esetben), hogy  $N$  különböző típusú részecske esetében (13)  $N$  szimultán egyenletből álló rendszert képvisel. Ezeket az egyenleteket úgy lehet megkapni külön-külön, hogy  $F$  helyébe  $E, t$  komponenseit helyettesítjük, egymásután  $t = 1, 2, \dots, N$ -et téve, és ennek megfelelően  $\beta_F$  helyébe is a megfelelő komponenset írjuk.

A következőkben szükségünk lesz a  $\Phi(F; \mathbf{s}^1; x)$  valószínűségnek megfelelő, a végső energiára vonatkozó valószínűségi sűrűségre. Ezt az utóbbit  $\Phi_{F'}(F; F'; x)$ -szel jelöljük, tehát

$$\Phi_{F'}(F; F'; x) dF'$$

a valószínűsége annak, hogy  $x$  mélységben a primért az  $F', F' + dF'$  intervallumban találjuk. Ez a sűrűségfüggvény nem létezik mindenütt, mert a primér energiájának élesen meghatározott értéke végig az egész kaszkádon szingularitást von maga után. A fenti sűrűség azonban mindig  $F'$  szerint integrálva fordul elő; ilyen esetekben mindig használhatjuk a következő helyettesítést:

$$\int \Phi_{F'}(F, F'; x) f(F') dF' = \int \Phi(F, F', x) \frac{\partial f(F')}{\partial F'} dF'.$$

b) *k*-részecske-eloszlás

8. §. A kétrészecske-eloszlás közvetlenül levezethető az egyrészecske-eloszlásból a következőképpen: valahányszor egy kaskád két részecskével végződik, a primérnek egy  $\xi, \xi + d\xi$  intervallumban ütköznie kell, ahol első szekunderjét kelti, és mind a primérnek, mind a szekundernek további szekunderek keletkezéséhez vezető katasztrofális ütközés nélkül kell útját folytatnia. Annak valószínűsége, hogy ez történjék:

$$\Phi_{F'}(F, F', \xi) W_2(F'; \mathbf{F}^2) \Phi(F_1; {}^0\mathbf{s}^1; x - \xi) \Phi(F_2; {}^1\mathbf{s}^2; x - \xi) d\xi dF' d\mathbf{F}^2,$$

ahol feltételezzük, hogy az ütközés a primér energiáját az  $F_1, F_1 + dF_1$  intervallumba eső energiára redukálta, olyan szekundért keltett, amelynek energiája az  $F_2, F_2 + dF_2$  intervallumba esik, és a végső kaskád az  $\mathbf{s}^2$  intervallumban van. Ha összeadjuk mindazoknak az — egymást kizáró — eseteknek a valószínűségét, amelyek mind ugyanahhoz a végeredményhez vezetnek, azt találjuk, hogy:

$$\begin{aligned} \Phi(F; \mathbf{s}^2; x) = \\ = \int_0^x \int_{F'} \int_{\mathbf{F}^2} \Phi_{F'}(F, F', \xi) W_2(F'; \mathbf{F}^2) \Phi(F_1; {}^0\mathbf{s}^1; x - \xi) \Phi(F_2; {}^1\mathbf{s}^2; x - \xi) dF' d\mathbf{F}^2 d\xi. \end{aligned} \quad (14)$$

Ha a (10) megoldásait helyettesítjük be  $\Phi_{F'}(F, F', x)$  és  $\Phi(F; \mathbf{s}^1; x)$  kifejezésébe, akkor  $\Phi(F; \mathbf{s}^2; x)$ -re explicit kifejezést kapunk.

9. §. Ez a rekurzív eljárás folytatható. A legegyszerűbb esetben, amikor feltételezzük, hogy minden ütközés a priméren kívül csak pontosan egy szekunder keletkezéséhez vezet, azaz  $W_k \equiv 0$  ha  $k > 2$ , a következő rekurzív összefüggést kapjuk:

$$\begin{aligned} \Phi(F; \mathbf{s}^k; x) = \sum_{l=1}^{k-1} \int_0^x \int_{F'} \int_{\mathbf{F}^2} \Phi_{F'}(F, F', \xi) W_2(F'; \mathbf{F}^2) \\ \Phi(F_1; {}^0\mathbf{s}^l; x - \xi) \Phi(F_2; {}^l\mathbf{s}^k; x - \xi) d\mathbf{F}^2 dF' d\xi. \end{aligned} \quad (15)$$

Megjegyezzük, hogy minden  $k$  részecskét tartalmazó kaskád egyértelműen fejezhető ki a (15) összegben álló  $k-1$ -típusúakkal, tehát minden lehetséges típust egyszer és csak egyszer számoltunk. Ha egyszer a (10) megoldása ismeretes, akkor (15) teljes rekurzív kiszámítási lehetőséget nyújt, ezzel tehát elvben le tudnánk írni az összes  $\Phi$ -k explicit kifejezését. Ha ezt az eljárást keresztülviesszük, akkor azt találjuk, hogy  $k$  növekedésével a tagok száma olyan gyorsan növekszik, hogy ezek az explicit kifejezések teljesen használhatatlanok lesznek. Megjegyezzük, hogy az ilyen explicit kifejezésben szereplő tagok nagy száma megfelel a kiválasztott végső eloszláshoz vezető családok nagyszámú típusának; ezt az 1. ábrán egy példával illusztráljuk.

10. §. Teljes analógiában a (15) rekurzív formulával, — ahol csak olyan ütközéseket vettünk tekintetbe, amelyek egyetlen szekunderhez vezetnek, —



felírhatjuk az általános rekurzív formulát. Azt kapjuk, hogy:

$$\Phi(F; \mathbf{s}^k; x) = \sum_{r=2}^k \sum_{\substack{0=k_0 \leq k_1 \leq k_2 \leq \dots \\ \dots \leq k_{r-1} \leq k_r=k}} \int_0^x \int_{\mathbf{F}^r} \Phi_{\mathbf{F}^r}(F, F', \xi) W_r(F', \mathbf{F}^r) \cdot \prod_{l=0}^{r-1} \Phi(F_l; \mathbf{s}^{k_{l+1}}; x - \xi) dF' d\mathbf{F}^r d\xi. \quad k \geq 2 \quad (16)$$

Ha számításba akarjuk venni a  $k=1$  esetet is, azaz olyan ütközéseket, amelyek nem vezetnek szekundárok keletkezéséhez, akkor a  $d\xi$  intervallumban történt első katasztrofális ütközés jellege szerint csoportosíthatjuk a záporokat: nevezetesen, hogy ez az ütközés keltett-e szekundárok vagy nem, és így:

$$\Phi(F; \mathbf{s}^k; x) = \Delta(F; \mathbf{s}^k) \varphi(F, x) + \sum_{r=1}^k \sum_{\substack{0=k_0 \leq k_1 \leq \dots \\ \dots \leq k_{r-1} \leq k_r=k}} \int_0^x \int_{\mathbf{F}^r} \varphi(F, \xi) W_r(F(\xi), \mathbf{F}^r) \prod_{l=0}^{r-1} \Phi(F_l; \mathbf{s}^{k_{l+1}}; x - \xi) d\xi d\mathbf{F}^r. \quad (17)$$

Ebben a kifejezésben

$$\Delta(F, \mathbf{s}^k) = \begin{cases} 1 & \text{ha } k=1 \text{ E, az } s_1\text{-en belül van és } t=t_1 \\ 0 & \text{ha a fenti feltételek közül egy vagy több nem teljesül.} \end{cases}$$

Ugyanúgy; mint az egyrészezske-kaszád esetében, az  $x$  szerinti integrálás eliminálható, hacsak  $O(F) = \beta_F$ . Egyszerű számítás eredményeként azt találjuk, hogy

$$\left( \frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} + \alpha(F) \right) \Phi(F; \mathbf{s}^k; x) = \sum_{r=1}^k \sum_{\substack{0=k_0 \leq k_1 \leq \dots \\ \dots \leq k_{r-1} \leq k_r=k}} \int W_r(F; \mathbf{F}^r) \prod_{l=0}^{r-1} \Phi(F_l; \mathbf{s}^{k_{l+1}}; x) d\mathbf{F}^r.$$

Az utóbbi egyenlet megint  $N$  egyenletből álló rendszert jelent, ez a rendszer  $x$  szerinti lépésről-lépésre való integrálás útján elvben megoldható.

### c) Tetszőleges számú részecske eloszlása

11. §. Folytatjuk a tárgyalást azon esemény valószínűségének kiszámításával, hogy az  $s_1, s_2, \dots, s_k$  intervallumok mindegyikében több részecske van. Minden  $s_l$  intervallumban csak  $t_l$  típusú részecskéket veszünk figyelembe. Vizsgálat alá vesszük tehát a

$$\Psi(F; \mathbf{s}^k; \mathbf{p}; x) \quad (18)$$

valószínűséget, ahol  $\mathbf{p}$  a következő  $k$  számú nem-negatív egészszámok helyett áll:

$$p_1, p_2, \dots, p_k.$$

$\Psi$  a valószínűsége annak, hogy az  $E$  energiájú és  $t$  típusú primér pontosan

$p_l$  számú ( $t_l$  típusú) olyan szekundért keltett, amelynek energiája az  $s_l$ ,  $l=1, 2, \dots, k$  intervallumban van. Ha (18) eloszlásával foglalkozunk, akkor kényelmes az  $s_1, s_2, \dots$  intervallumokat úgy választani, hogy ne fedjék egymást, és ezenfelül töltsék ki az egész számbajövő energiatartományt. Az intervallumokat tehát úgy kell választani, hogy bármilyen  $t_l$  típusú és bármilyen  $E_l$  energiájú részecske az  $s_k$  intervallumok egyikébe és csak az egyikébe tartozzék.

Hogy a  $\Psi$  valószínűségekre diffúziós egyenleteket kapjunk, ki kell fejeznünk ezeket a mennyiségeket a fentebb tárgyalt  $\Phi$  mennyiségekkel. Evégett tekintsük mindazokat a lehetséges intervallum-sorozatokat, amelyek a rögzített

$$s_1, s_2, \dots, s_k$$

intervallumokból összeállíthatók. Tekintsünk tehát egy rögzített  $s^k$  vektort és építsünk fel adott komponenseiből egy új vektort a következő módon:

$$\mathbf{T}_\alpha = (s_{\alpha_1}, s_{\alpha_2}, \dots, s_{\alpha_\mu}),$$

ahol az  $\alpha_v$ -k mindegyike az  $1, 2, \dots, k$  értékeket veheti fel. Rögzített  $s^k$ -ra (mely csak egymást kizáró intervallumokat tartalmaz) rögzített  $x$  mélységben minden valóságos zápor egyértelműen felel meg az  $\mathbf{T}_\alpha$  intervallum-sorozat egyikének. Valóban, tekintsünk egy olyan záport, amelyik  $x$  mélységben  $\mu$  részecskét tartalmaz, az első részecske az  $s_{\alpha_1}$  intervallumban, a második az  $s_{\alpha_2}$  intervallumban, ..., az utolsó az  $s_{\alpha_k}$  intervallumban van; ekkor azt lehet mondani, hogy az egész zápor az általánosított  $\mathbf{T}_\alpha$  intervallumban van, ahol  $\alpha = \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k$ .

Annak valószínűsége, hogy egy  $F$  primértől eredő zápor  $x$  mélységben az  $I_\alpha$  intervallumban van,  $\Phi(F; \mathbf{T}_\alpha; x)$ .

Most generátorfüggvényt vezetünk be:

$$G(F; \mathbf{s}^k; x; \mathbf{u}) = \sum_{\alpha} u_{\alpha} \Phi(F; \mathbf{T}_{\alpha}; x), \quad (19)$$

ahol

$$\mathbf{u} = u_1, u_2, \dots, u_k,$$

(az  $\mathbf{u}$  tehát  $k$  számú  $u_1, u_2, \dots, u_k$  változót jelent) és

$$u_{\alpha} = u_{\alpha_1} u_{\alpha_2} \dots u_{\alpha_{\mu}} \quad (20)$$

az ezekből a változókból felépített szorzat.

Rögzített  $\alpha$  vektorra a (20) szorzatban összegyűjthetjük mindazokat az  $u_{\alpha_i}$ -eket, amelyek  $u_1$ -gyel egyenlők, azokat, amelyek  $u_2$ -vel egyenlők, és így tovább. A (20) szorzatot tehát mindig átrendezhetjük úgy, hogy

$$u_{\alpha} = u_1^{p_1} u_2^{p_2} \dots u_k^{p_k} = \mathbf{u}^{\mathbf{p}}$$

alakú legyen, tehát ilyen módon minden  $\alpha$ -nak egy  $\mathbf{p}$  vektort feleltethetünk meg. Természetesen általában igen sokféle  $\alpha$  vektornak felel meg ugyanaz a  $\mathbf{p}$  vektor. Ennek a korrespondenciának a következő világos értelme van:

Minden zápor végső állapotának egy  $\alpha$  vektor felel meg, amint erről már szó volt. Közös sajátága minden olyan  $\alpha$  állapotnak, amely ugyanahhoz a  $\mathbf{p}$



vektorhoz tartozik, hogy az  $\mathbf{T}_\alpha$  intervallum-vektornak pontosan  $p_1$  számú  $s_1$  komponense van, mindegyikben egy-egy  $t_1$  típusú részecskével,  $p_2$  számú  $s_2$  komponense van, mindegyikben egy-egy  $t_2$  típusú részecskével, végül  $p_k$  számú  $s_k$  komponense van, mindegyikben egy-egy  $t_k$  típusú részecskével. Mindazoknak az állapotoknak tehát, amelyek ugyanahhoz a  $\mathbf{p}$  vektorhoz tartoznak, közös tulajdonsága, hogy pontosan  $p_1$  számú  $t_1$  típusú részecske van az  $s_1$  intervallumban,  $p_2$  számú  $t_2$  típusú részecske az  $s_2$  intervallumban, ..., végül  $p_k$  számú  $t_k$  típusú részecske az  $s_k$  intervallumban. A (18) jelölés segítségével tehát azt látjuk, hogy

$$\sum_{(\mathbf{p})} u_\alpha \Phi(F; \mathbf{T}_\alpha; x) = \mathbf{u}^p \Psi(F; \mathbf{s}^k; \mathbf{p}; x), \quad (21)$$

ahol az összegezést mindazokra az  $\alpha$  vektorokra kell kiterjeszteni, amelyek ugyanahhoz a  $\mathbf{p}$  vektorhoz tartoznak. A (19)-cel értelmezett generátorfüggvény tehát így fejezhető ki:

$$G(F; \mathbf{s}^k; x; \mathbf{u}) = \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{u}^p \Psi(F; \mathbf{s}^k; \mathbf{p}; x), \quad (22)$$

ahol az összegezést a  $\mathbf{p}$  vektor minden lehetséges értékére kell kiterjeszteni, azaz

$$\sum_{\mathbf{p}} = \sum_{p_1, p_2, \dots, p_k=0}^{\infty}.$$

A generátorfüggvény segítségével az eloszlás nyomatékai a szokásos módon származtathatók le.

12. §. A generátorfüggvényre szóló diffúziós egyenlet a (17)-ből közvetlenül levezethető. Valóban, vezessünk be (17)-ben

$$\mathbf{s}^k \text{ helyett } \mathbf{T}_{\alpha-t},$$

továbbá vezessük be az

$$\alpha(l, m) = (\alpha_{l+1}, \alpha_{l+2}, \dots, \alpha_m), \quad l < m$$

vektorokat. Akkor a (17)-ben szereplő  ${}^l\mathbf{s}^m$  helyettesíthető  $\mathbf{T}_{\alpha(l, m)}$ -mel.

Szorozzuk meg mármost a (17) egyenletet  $u_\alpha$ -val; ha  $\alpha$ -nak  $\mu$  komponense van, akkor írhatjuk

$$u_\alpha = u_{\alpha(k_0, k_1)} u_{\alpha(k_1, k_2)} \dots u_{\alpha(k_{\mu-1}, \mu)},$$

ahol a  $k_l$ -ek a

$$0 = k_0 < k_1 < k_2 < \dots < k_{\mu-1} < k_\mu = \mu$$

feltételnek eleget tevő egész számok, az eredményül kapott egyenlet pedig így írható:

$$\begin{aligned} u_\alpha \Phi(F; \mathbf{T}_\alpha; x) &= u_\alpha \varphi(F, x) A(F(x); \mathbf{T}_\alpha) + \\ &+ \sum_{r=1}^{\mu} \sum_{\substack{0=k_0 < k_1 < \dots < k_{r-1} < k_r = \mu \\ \dots < k_{\mu-r} < k_{\mu-r+1} < \dots < k_{\mu-1} < k_\mu = \mu}} \int_0^x \int_{\mathbf{F}^r} \varphi(F, \xi) W_r(F(\xi); \mathbf{F}^r) \prod_{l=0}^{r-1} u_{\alpha(k_l, k_{l+1})} \\ &\quad \Phi(F_{l+1}; \mathbf{T}_{\alpha(k_l, k_{l+1})}; x - \xi) d\xi d\mathbf{F}^r. \end{aligned} \quad (23)$$

Folytassuk a levezetést azzal, hogy (23)-at minden  $\underline{\alpha}$ -ra összegezzük, azaz elvégezzük a következő összegezést:

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\mu}=1}^k$$

a (23) mindkét oldalán. Összegezzünk először az integrál előtt álló tagban, tehát:

$$\varphi(F, x) \sum_{\underline{\alpha}} u_{\underline{\alpha}} \mathcal{A}(F(x); \mathbf{T}_{\underline{\alpha}}) = \varphi(F, x) \sum_{\alpha=1}^k u_{\alpha} \mathcal{A}(F(x), s_{\alpha});$$

mivel  $\mu > 0$ -ra a  $\mathcal{A}$  függvény értelmezése szerint nulla, a  $\mu$ -re szóló szumma eltűnik. A jobboldalon álló összeg egy tagra redukálódik, mivel egy és csak egy olyan  $\alpha$  van, amelyre  $F(x)$  az  $s_{\alpha}$ -n belül van, úgyhogy

$$\varphi(F, x) \sum_{\underline{\alpha}} u_{\underline{\alpha}} \mathcal{A}(F(x); \mathbf{T}_{\underline{\alpha}}) = \varphi(F, x) u_{F(x)}.$$

Egyszerűség kedvéért a (23) jobboldalán álló második tagot sematikusán, a következő alakban írjuk:

$$\sum_{\nu=1}^{\mu} \sum_{\substack{0=k_0 < k_1 < \dots < k_{\nu} \\ \dots < k_{\mu} = \mu}} D(r) \prod_{\lambda=0}^{r-1} A(\alpha_{k_{\lambda}+1}, \dots, \alpha_{k_{\lambda+1}}, r, \lambda) d\mathbf{F}^r d\xi.$$

Felcseréljük az összegezés és az integrálás sorrendjét, és akkor feladatunk a következő összeg kiszámítására vezet vissza:

$$B = \sum_{\mu=1}^{\infty} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\mu}=1}^k \sum_{\nu=1}^{\mu} D(r) \sum_{\substack{0=k_0 < k_1 < \dots < k_{\nu} \\ \dots < k_{\mu} = \mu}} \prod_{\lambda=0}^{r-1} A(\alpha_{k_{\lambda}+1}, \dots, \alpha_{k_{\lambda+1}}, r, \lambda), \quad (24)$$

ahol

$$\left. \begin{aligned} A(\alpha_{k_{\lambda}+1}, \dots, \alpha_{k_{\lambda+1}}, r, \lambda) &= u_{\alpha(k_{\lambda}, k_{\lambda+1})} \Phi(F_{\lambda}; \mathbf{T}_{\alpha(k_{\lambda}, k_{\lambda+1})}; x - \xi; \mathbf{u}) \\ \text{és} \quad D(r) &= \varphi(F, \xi) W_r(F(\xi), \mathbf{F}^r). \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

Hogy a (24)-gyel kijelölt összegezést keresztülvihessük, első lépésként új összegezési változókat vezetünk be, mégpedig:

$$k_{\lambda+1} - k_{\lambda} = l_{\lambda}, \quad \lambda = 0, 1, \dots, r-1,$$

tehát

$$k_{\lambda} = \sum_{\lambda'=1}^{\lambda} l_{\lambda'}.$$

Szeponálva a  $r$  ill.  $\mu$  szerinti összegezést, írhatjuk:

$$A = \sum_{r, \mu=1}^{\infty} C_{r\mu},$$

ahol

$$C_{r\mu} = \begin{cases} 0, & \text{ha } r > \mu \\ D(r) \sum_{\substack{0=k_0 < k_1 < \dots < k_{\nu} \\ \dots < k_{\mu} = \mu}} \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\mu}=1}^k \prod_{\lambda=0}^{r-1} A(\alpha_{k_{\lambda}+1}, \dots, \alpha_{k_{\lambda+1}}, r, \lambda), & \text{ha } r \leq \mu. \end{cases}$$



Az  $l$ -ek segítségével a  $k$ -k  $\nu \leq \mu$ -re következőképpen írhatók:

$$C_{\nu\mu} = D(\nu) \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\mu}=1}^k \sum_{l_1, l_2, \dots, l_{\nu}=1}^{l_1+l_2+\dots+l_{\nu}=\mu} \prod_{\lambda=0}^{\nu-1} A(\alpha_{k_{\lambda}+1}, \dots, \alpha_{k_{\lambda}+1}, \nu, \mu).$$

Ismét megcseréljük az összegezés sorrendjét az utolsó kifejezésben és így azt kapjuk, hogy:

$$C_{\nu\mu} = D(\nu) \sum_{l_1, l_2, \dots, l_{\nu}=1}^{l_1+l_2+\dots+l_{\nu}=\mu} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{k_1}=1}^k \sum_{\alpha_{k_1+1}, \dots, \alpha_{k_1+l_1}=1}^{\nu-1} \dots$$

$$\dots \sum_{\alpha_{k_{\nu-1}+1}, \dots, \alpha_{\mu}=1}^k \prod_{\lambda=0}^{\nu-1} A(\alpha_{k_{\lambda}+1}, \dots, \alpha_{k_{\lambda}+l_{\lambda}}, \nu, \lambda); \mu \geq \nu.$$

A fenti  $\alpha$  összegezés mindegyike csak az egyik  $A$  tényezőt érinti, úgyhogy ezek az összegezés a szorzásjel alá vihetők. Továbbá az indexek jelzését megváltoztatva:

$$C_{\nu\mu} = D(\nu) \sum_{l_1, l_2, \dots, l_{\nu}=1}^{l_1+l_2+\dots+l_{\nu}=\mu} \prod_{\lambda=0}^{\nu-1} \left( \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{l_{\lambda}}} A(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{l_{\lambda}}, \nu, \lambda) \right), \mu \geq \nu.$$

Összegezve  $\mu$  minden értékére, azt találjuk, hogy:

$$\sum_{\mu=\nu}^{\infty} C_{\nu\mu} = D(\nu) \sum_{l_1, l_2, \dots, l_{\nu}=1}^{\infty} \prod_{\lambda=1}^{\nu} \left( \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{l_{\lambda}}} A(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{l_{\lambda}}, \nu, \lambda) \right).$$

Úgy mint előbb, mindegyik  $l$ -összegezés a szorzásjel alatt álló tényezők közül csak egyet-egyet érint, ezeket az összegezéseket tehát a szorzásjel alá vihetjük, és akkor:

$$\sum_{\mu=\nu}^{\infty} C_{\nu\mu} = D(\nu) \prod_{\lambda=1}^{\nu} \left( \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{l_{\lambda}}} A(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{l_{\lambda}}, \nu, \lambda) \right).$$

A szorzásjel alatt álló kettős összeg egyenértékű az  $\alpha$  minden értékére való összegezéssel, tehát végülis  $\nu$ -re összegezve:

$$B = \sum_{\nu=1}^{\infty} \sum_{\mu=\nu}^{\infty} C_{\nu\mu} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \prod_{\lambda=1}^{\nu} \left( \sum_{\alpha} A(\alpha, \nu, \lambda) \right).$$

Ha most  $A$  és  $D$  értékét (25)-ből behelyettesítjük, akkor  $\mathbf{F}^{\nu}$ -re és  $\xi$ -re való integrálás után megkapjuk a generátorfüggvény diffúziós egyenletét:

$$G(F; \mathbf{s}^k; x; \mathbf{u}) = u_{F(x)} \varphi(F, x) +$$

$$+ \int_0^x d\xi \sum_{\nu \geq 0} \varphi(F, x - \xi) \int_{\mathbf{F}^{\nu}} W_{\nu}(F(x - \xi); \mathbf{F}^{\nu}) \prod_{i=1}^{\nu} G(F_i; \mathbf{s}^k, \xi; \mathbf{u}) d\mathbf{F}^{\nu}. \quad (26)$$

A (26) egyenlet  $N$  számú szimultán egyenletet képvisel, ez az  $N$  egyenlet megfelel a tekintetbe vett  $N$  részecsketípusnak; ezeket az egyenleteket úgy kaphatjuk meg, hogy mind  $u_F$  mind  $F$  helyébe rendre a megfelelő komponensét helyettesítjük, az  $N$  részecsketípusnak megfelelően. A (26) egyenlet

ugyanazon a módon egyszerűsíthető, mint ahogyan azt a diffúziós egyenlet más alakjainál már megmutattuk, ha feltesszük, hogy (11) teljesül, és így

$$F(x) = F - \beta_F x,$$

ahol  $\beta_F$  azon részecsketípus folytonos energiavesztésének mértéke, amelyik típusnak  $F$  megfelel. Így tehát, hogy egyszerűsítést érjünk el, (26)-ot elosztjuk  $\varphi(F, x)$ -szel és alkalmazzuk a

$$\left( \frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} \right)$$

operátort. Ezt kapjuk:

$$\begin{aligned} \varphi(F, x) \left( \frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} \right) \left( \frac{G(F; \mathbf{s}^k; x, \mathbf{u})}{\varphi(F, x)} \right) = \\ = \sum_{\nu > 0} \int_{\mathbf{F}^\nu} W_\nu(F; \mathbf{F}^\nu) \prod_{l=1}^{\nu} G(F_l; \mathbf{s}^k; x, \mathbf{u}) + \\ + \varphi(F, x) \int_0^x \left( \frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} \right) \int_{\mathbf{F}^\nu} \left\{ \frac{\varphi(F, x - \xi)}{\varphi(F, x)} W_\nu(F - \beta_F(x - \xi); \mathbf{F}^\nu) \right\} \cdot \\ \cdot \prod_{l=1}^{\nu} G(F_l; \mathbf{s}^k; \xi; \mathbf{u}) d\xi d\mathbf{F}^\nu, \end{aligned}$$

$$\text{mivel } \frac{\varphi(F, x - \xi)}{\varphi(F, x)} = \exp \left\{ \frac{1}{\beta_F} \int_{F - \beta_F x - \beta_F \xi}^{F - \beta_F x} \alpha(F') dF' \right\}.$$

Látjuk, hogy az integrandus a jobboldalon  $F$ -et és  $x$ -et csak az  $F - \beta_F x$  kombinációban tartalmazza, úgyhogy a

$$\frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F}$$

operátor megsemmisíti az integrandust. Vegyük figyelembe, hogy

$$\varphi(F, x) \left( \frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} \right) \frac{1}{\varphi(F, x)} = - \left( \frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} \right) \ln \varphi(F, x) = \alpha(F),$$

ezért

$$\varphi(F, x) \left( \frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} \right) \left( \frac{G(F, \mathbf{s}^k; x, \mathbf{u})}{\varphi(F, x)} \right) = \left( \frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} + \alpha(F) \right) G(F, \mathbf{s}^k; x, \mathbf{u}).$$

Végülis (26) helyett a következőt kapjuk:

$$\left( \frac{\partial}{\partial x} + \beta_F \frac{\partial}{\partial F} + \alpha(F) \right) G(F, \mathbf{s}^k; x, \mathbf{u}) = \sum_{\nu > 0} \int_{\mathbf{F}^\nu} W_\nu(F, \mathbf{F}^\nu) \prod_{l=1}^{\nu} G(F, \mathbf{s}^k; x, \mathbf{u}) d\mathbf{F}^\nu. \quad (27)$$

A (27) egyenlet annak a  $G$ -egyenletnek az általánosítása, melyet korábban már megadtam [4].\*

\* Az eredeti dolgozatban a mi (26) egyenletünknek megfelelő egyenlet hiányos: az  $u_{F(x)} \varphi(F, x)$  tag tévedés folytán kimaradt. Ez a hiány nem befolyásolja az eredményt, mivel csak a mi (27) egyenletünknek megfelelő egyenlet került alkalmazásra, az viszont hibátlan (lásd [5]).



### További általánosítások

13. §. A (26)  $G$ -egyenlet levezetésénél nem használtuk ki azt a tényt, hogy az  $E$  energiát jelent.  $E$  és hasonlóképpen  $F$  is nem más, mint a primér valamilyen módon jellemző paraméter. A levezetésnek ezt a tulajdonságát kihasználhatjuk és mindjárt felírhatunk olyan egyenleteket, amelyek nem az energiára, hanem más mennyiségekre szólnak. Így például nem okoz nehézséget, hogy a részecskék energiája helyett impulzusuknak három komponensét vezessük be, így pedig az energiaeoszlással együtt a szög szerinti eloszlást meghatározó egyenleteket kapunk.

Az utóbbi esetben az egyenletek új vonása az, hogy egy részecske folyamatos ütközések során megfordíthatja irányát, ezért a primér szekundéreket kelthet saját maga *mögött*, úgyhogy  $\xi$  szerint  $-\infty$ -tól  $+\infty$ -ig kell integrálnunk, nem pedig 0-tól  $\infty$ -ig. Ez az utóbbi alak azonban kényelmetlen és nem alkalmas arra, hogy a megoldást lépésről-lépésre való integrálás útján számítsuk ki. Ezt a nehézséget úgy győzhetjük le, hogy független változónak az  $x$  koordináta helyett a  $t$  időt vezetjük be. Akkor az integrációkat mindig 0-tól  $\infty$ -ig terjedő intervallumra kell kiterjeszteni és a  $G$ -függvény a részecskék  $t$  időpontbeli eloszlását adja meg, nem pedig azt, hogy egy meghatározott  $y, z$  síkon milyen eloszlásban mennek át. A részecskék koordinátája stochasztikus változónak tekinthető és belevehető az  $s_i$  intervallumok értelmezésébe. Így például egy bizonyos  $t$  időpontban vizsgálhatjuk azokat a részecskéket, amelyek ebben az időpontban két  $x=a$  és  $x=b$  sík között vannak.

Ebben a dolgozatban nem foglalkozunk ezzel az esettel, hanem csak olyan esetekre szorítkozunk, ahol a részecskék szög szerinti szóródása elég kicsi, annyira, hogy a „visszaszórás” jó közelítéssel elhanyagolható.

Teljesség kedvéért explicit felírjuk azokat a  $G$ -egyenleteket, amelyek a szélességi kiterjedésre vonatkoznak, de feltesszük, hogy a szög szerinti szóródások kicsik.

Bevezetjük tehát az  $A = \operatorname{tg} \vartheta$  mennyiséget, ahol  $\vartheta$  a primér részecske mozgási irányának az  $x$  tengellyel bezárt szöge, továbbá a  $Z$  mennyiséget, amely a primér részecske  $x$  tengelytől való kezdeti távolságának a  $z$  tengelyre eső vetületét jelenti.

Így a primér állapota most egy

$$\mathfrak{F} = F, A, Z \quad (28)$$

vektorral fejezhető ki. Hasonlóképpen általánosítjuk az  $s^k$  intervallumvektort is, mégpedig úgy, hogy  $k$  számú olyan  $s_r$ ,  $r = 1, 2, \dots, k$  intervallumot tartalmazzon, melyekben nem csak a részecske energiája és típusa legyen rögzítve, hanem az az intervallum is, amelyben a részecske térbeli, ill. szög szerinti szóródásának megfelelően fekdühet. Ha például feltesszük, hogy  $N$  részecsketípusunk van, a számbajövő energiatartományt  $n$  részre osztjuk, a lehetséges térbeli szóródást  $m$  részre, a lehetséges szög szerinti elhajlást  $l$



részre, akkor

$$k = Nnm l$$

számú általánosított  $s''$  intervallumunk lesz.

Így például  $k = 16$ , ha az intervallumokat a következőképpen definiáljuk:

$$\begin{array}{ll} N=2 & \text{próton vagy neutron} \\ n=2 & \text{energia } Mc^2 \left\{ \begin{array}{l} \text{fölött} \\ \text{alatt} \end{array} \right. \\ m=2 & \text{lineáris szóródás } \left\{ \begin{array}{l} \text{több} \\ \text{kevesebb} \end{array} \right. \text{ mint } 1 \text{ cm} \\ l=2 & \text{szögszóródás } \left\{ \begin{array}{l} \text{több} \\ \text{kevesebb} \end{array} \right. \text{ mint } 30^\circ. \end{array}$$

A fenti megkülönböztetés alapján egy próton-neutron-kaskád minden részecskéje egyértelműen osztályozható: mindegyik részecske a lehetséges 16 kategória valamelyikébe tartozik, ezeket a kategóriákat jelöljük  $s_1, s_2, \dots, s_{16} = \mathbf{s}^{16}$  vektorral.

A generátorfüggvény az általánosított változókkal most így írható:

$$G(\mathcal{F}, \mathbf{s}^k; x; \mathbf{u}) = \sum \mathbf{u}^p \Psi(\mathcal{F}, \mathbf{s}^k, \mathbf{p}; x), \quad \mathbf{p} = p_1, p_2, \dots, p_k, \quad (29)$$

ahol  $\Psi(\mathcal{F}, \mathbf{s}^k, \mathbf{p}; x)$  a valószínűsége annak, hogy az  $\mathcal{F}$ -ral értelmezett primér olyan kaskádot kelt, hogy az  $x$  mélységben éppen  $p_l$  részecske van az  $s_l$  intervallumban,  $l = 1, 2, \dots, k$ . Minden intervallum jellemzi a részecske típusát, bizonyos korlátok között az energiáját, térbeli és szög szerinti szóródását.

A  $G$ -egyenlet erre az általánosított folyamatra pontosan ugyanúgy vezethető le, mint ahogyan levezettük az előbbi kevésbbé általános esetben; valóban, főleg jelölés kérdése az általánosabb egyenlet leírása.

14. §. Ahhoz, hogy megkapjuk az új egyenleteket, ugyanúgy, mint a (26) egyenlet levezetésénél, külön kell kezelni azokat az eseteket, amelyekben nincsen katasztrofális ütközés. A valószínűsége-sűrűség arra az eseményre nézve, hogy a primér az  $\mathcal{F}$  állapotból egy  $\mathcal{F}'$  körüli állapotba került katasztrofális ütközés nélkül, a következőképpen írható:

$$q(\mathcal{F}, \mathcal{F}'; x).$$

Ez a függvény a szokásos úton határozható meg, amint ezt megmutattuk a 16. §-ban. A generátorfüggvénynek az a része, amely katasztrofális ütközés nélküli átmenetnek felel meg, így írható tehát:

$$g(\mathcal{F}, \mathbf{s}^k; x; \mathbf{u}) = \int_{\mathcal{F}'} q(\mathcal{F}, \mathcal{F}'; x) u_{\mathcal{F}} d\mathcal{F}', \quad (30)$$

$x=0$ -ra:

$$g(\mathcal{F}, \mathbf{s}^k; x=0; \mathbf{u}) = u_{\mathcal{F}}.$$

Az  $\mathbf{u}=1$  különleges esetben  $u_{\mathcal{F}} \equiv 1$ , és

$$g(\mathcal{F}, \mathbf{s}^k; x; 1) = \int_{\mathcal{F}'} q(\mathcal{F}, \mathcal{F}'; x) d\mathcal{F}' = q(\mathcal{F}; x), \quad (31)$$



ahol az utolsó kifejezés a valószínűsége annak, hogy az  $x$  úton nem volt katasztrofális ütközés, de az  $\mathfrak{F}$  állapot valahogyan megváltozott. Az  $u_F$  diszkontinuus változó  $\mathfrak{F}$ -nek minden értékére egyenlő az  $\mathbf{u}$  valamelyik  $u_l$  komponensével, úgy, hogy  $\mathfrak{F}'$  az  $s_l$  intervallum belsejében van.

A  $G$ -egyenlet tehát a következőképpen írható fel, ha kizárjuk a részecskék „visszaszóródásának” lehetőségét:

$$G(\mathfrak{F}, \mathbf{s}^k; x; \mathbf{u}) = g(\mathfrak{F}, \mathbf{s}^k; x; \mathbf{u}) + \int_0^x \int_{\mathfrak{F}'} \varphi(\mathfrak{F}, \mathfrak{F}'; \xi) \sum_{\nu \geq 1} \int_{\mathfrak{F}''} W_\nu(\mathfrak{F}', \mathfrak{F}'') \prod_{l=1}^{\nu} G(\mathfrak{F}_l, \mathbf{s}^k; x - \xi; \mathbf{u}) d\xi d\mathfrak{F}' d\mathfrak{F}'' \quad (32)$$

$W_\nu(\mathfrak{F}', \mathfrak{F}'')$  az olyan ütközéseknek megfelelő valószínűségsűrűség, amelyeknél egy  $\mathfrak{F}$  primér  $\nu$  számú  $\mathfrak{F}_1, \mathfrak{F}_2, \dots, \mathfrak{F}_\nu$  szekundért keltett. Mind a szekundérek, mind a primért energiájuk, típusuk, térbeli és szög szerinti szóródásuk írja le.

#### IRODALOM

1. С. З. Беленький, Лавинные процессы в космических лучах. Гостехиздат, Москва—Ленинград, 1948.
2. L. Jánossy, Cosmic Rays, Oxford, Clarendon Press, 1950.
3. B. Rossi and K. Greisen, Cosmic-Ray Theory, Rev. Mod. Phys. 13, 240, 1941.
4. L. Jánossy, Proc. Phys. Soc. 63, 241, 1950.
5. L. Jánossy, Proc. Phys. Soc. 66, 117, 1953.

# A HJ-MOLEKULA KÖTÉSÉNEK ELMÉLETÉRŐL\*

GÁSPÁR REZSŐ és KÓNYA ALBERT

Budapesti Műszaki Egyetem Fizikai Intézete

## *Bevezetés*

Kétatomos molekulák állandóinak kiszámítása már a legegyszerűbb homopoláros molekula, a  $H_2$ -molekula esetében is igen bonyolult feladat s mint az irodalomból kitűnik, a számítások csupán a legkönnyebb molekulák esetében voltak keresztülvihetők [1]. Heteropoláros molekulákra a kötés értelmezése minden nagyobb nehézség nélkül vihető keresztül [2], de az állandók pontosabb meghatározása a molekulát alkotó atomok kölcsönös polarizációjának pontos tekintetbevételét és a fellépő van der-Waals erők kiszámítását igényeli. Ezek az erők, mivel az atomok elektronfelhői egymást fedik és az egyik mag a másik felhőjébe kerül, igen nagy bizonytalansággal számolhatók csak. Aránylag egyszerűbbek a számítások a halogén hidrideknél, ahol a van der Waals-erők eltűnnek és az elektronfelhő proton által való polarizációja is egyszerűbben számítható. Az ide vonatkozó munkák azonban szintén csak a könnyebb halogén hidridek tárgyalására terjednek ki, mert a számítások keresztülviteléhez szükséges Hartree-tabellák csak ezekre állnak rendelkezésre [3].

A hidrogénhalogenid molekulák tárgyalása azonban több nehézség legyőzését teszi szükségessé. A legfontosabbról itt akarunk részletesebben megemlékezni. A hidrogénhalogenidek egyrészt u. i. atomokra disszociálnak, ami arra mutat, hogy ebből a szempontból nézve homopoláros molekulák módjára viselkednek; másrészt azonban már kicsiny, de jól mérhető elektromos dipólusnyomatékuk van s így ez a tulajdonságuk világosan arra mutat, hogy nem lehet őket teljes mértékben a homopoláros molekulák közé sorolni. Ezeket a molekulákat valahol a homopoláros és heteropoláros molekulák között kell elhelyeznünk s így ezek átmeneti típust képviselnek. Ezeknek a molekuláknak az elméleti tárgyalását úgy végezhetjük el, hogy a negatív halogén ionból és egy pozitív hidrogén ionból, azaz egy protonból építjük fel őket. A kölcsönhatási energia számításánál az a lényeges, hogy nemcsak az elsőrendű kölcsönhatási energiát, hanem a másodrendűt, azaz a polarizációs energiát is figyelembe vehetjük. Ezáltal ugyanis szemléletesen szólva az elektronfelhő egy része a protonhoz húzódik vissza, a molekula elveszti tiszta

\* Megjelent először német nyelven, Acta Physica, III, (1953), 31. Bemutatta Gombás Pál akadémikus az 1952. febr. 2-án tartott felolvasó ülésen.



ionos jellegét és így éppen a homopoláros és heteropoláros állapot közti, a természetben tényleg előforduló átmeneti állapot áll elő.

Csak az utóbbi időkben a *Gombás* által kidolgozott, a korrelációs korrekcióval bővített statisztikus atom-modell segítségével volt remélhető, hogy a nehezebb halogén hidridekre is a siker reményében számítások legyenek keresztülvihetők [4]. A korrelációs korrekcióval bővített modell alapulvétele igen lényeges, mert az atomok ill. ionok polarizálhatóságára statisztikus atom elméleti számításokkal csak úgy kapunk a kísérletivel megegyező értékeket, ha a korrelációs korrekcióval bővített modellből indulunk ki [5].

### 1. §. A J<sup>-</sup>-ion statisztikus modellje

Az atom statisztikus elméletében *Gombás* adott egy modellt, melynek keretében pozitív és negatív ionok és semleges atomok egyaránt stabilisok és mint különböző atomtulajdonságok számításánál kitént, olyan esetekben is igen sikeresen használható fel, ahol az atomoknak a magtól távolabb fekvő részei játszik a főszerepet. Ez a modell a közismert Thomas—Fermi—Dirac-modellnek egy további energiataggal, az antiparallel spinű elektronok közt fellépő taszító erőkből eredő ú. n. korrelációs energiával való bővítése útján keletkezik. A korrelációs energia az energiához csak kis korrekciót ad és a modell fő (alapvető) különbsége a Thomas—Fermi—Dirac-moddal szemben abban áll, hogy az ion, ill. atomsugarak az előbbiekkal szemben jelentősen kisebbek lesznek és ennek megfelelően a sűrűségeloszlás a megfelelő hullámmechanikai sűrűségeloszlásnak jobb közelítése. A sűrűségváltozás azonban csak az atom, ill. ion szélén jelentős, belül a Thomas—Fermi—Dirac-modell elektroneloszlásába megy át. Mindezekből nyilvánvaló, hogy az új modell ott fog jelentős eredményeket felmutatni, ahol olyan atom, ill. molekula tulajdonságok számítására használjuk fel, melyekre az atom külső elektronjai vannak befolyással. A tárgyalás statisztikus természetének megfelelően nemes gázszerű ionok, ill. atomok tárgyalhatók kielégítő pontossággal. Problémánk tárgyalása folyamán a HJ molekulát egy protonból és egy negatív jód ionból gondoljuk felépítve s mivel utóbbinak nemesgázszerű konfigurációja van (Xe konfiguráció), a statisztikus tárgyalási mód jól alkalmazható. A negatív ion elektroneloszlását a

$$\bar{v} = \frac{Z}{4\pi(u^*)^3} \frac{N}{N-1} \left( \frac{\varphi}{x} \right)^{3/2} \quad (1)$$

kifejezés adja meg, ahol

$$\varphi = \varphi_0 + k\eta_0 \quad \text{és} \quad x = r/u^*; \quad (2)$$

$Z = 53$  a jód rendszáma,  $N = 54$  az ion elektronjainak száma.

$$u^* = \left( \frac{N}{N-1} \right)^{2/3} \frac{1}{4} \left( \frac{9\pi^2}{2Z} \right)^{1/3} a_0$$



a hosszegység megváltoztatásánál szereplő állandó;  $\varphi_0$  a semleges atomra vonatkozó Fermi-féle függvény, melyet többen tabelláztak és  $\eta_0$  egy ugyancsak Fermi által tabellázott függvény [2]. A  $k$  állandó értékét és az ion véges rádiuszát  $x_0$ -t *Gombás* adja meg:

$$k = +1,82 \cdot 10^{-6} \quad \text{és} \quad x_0 = 22,30. \quad (3)$$

Az ionrádiuszt az általunk számításaink folyamán használt dimenzió nélküli egységekben adtuk meg. Atomi egységekre a (2) formulával számíthatók át.

## 2. §. A statisztikus perturbációszámítás rövid ismertetése

Mint láttuk, molekulák kötési energiájának számításánál a legnagyobb feladat az atomok polarizációjának tekintetbevétele. *Gombás* az általa kidolgozott modell keretében egy perturbációszámítási módszert ad meg, mellyel esetünkben a polarizációs energia számítását elvégezhetjük [5]. Legyen  $v$  egy perturbációs potenciál és  $\nu(r)$  azon atom sűrűsége az  $r$  helyen, melynek perturbációját számítani akarjuk. Ekkor a perturbációs hatás következtében beálló sűrűségváltozás

$$\delta \nu = \frac{3e}{5x_k} \lambda (v - v_0) \nu^{1,3}(r), \quad (4)$$

ahol  $e$  az elemi töltés,  $x_k = (3/10) (3\pi^2)^{2/3} e^2 a_0$  egy atomi állandó,  $v_0$  pedig a perturbációs potenciál középértéke:

$$v_0 = \frac{\int v \nu^{1,3} d\tau}{\int \nu^{1,3} d\tau}, \quad (4')$$

ahol  $d\tau$  a térfogatelem.  $\lambda$  egy variációs paraméter, melyet abból a követelményből fogunk meghatározni, hogy az energia minimum legyen.

Mivel az összelektronszám nem változik meg, fennáll a

$$\delta N = \int \delta \nu d\tau = 0 \quad (5)$$

egyenlet. (4) és (5) felhasználásával könnyen belátható, hogy egy tetszőesszerinti additív állandó a perturbációs potenciálban a sűrűségeloszlás megváltozását nem befolyásolja.

Az elsőrendű perturbációs energia  $\eta_1$  a perturbációs potenciál középértékét adja (az eredeti sűrűségeloszlással). Az itt bevezetett jelölésekkel

$$\eta_1 = -e \int v \nu d\tau. \quad (6)$$

A másodrendű perturbációs energia

$$\begin{aligned} \eta_2 &= -U_s + U_p + U_k - U_a \\ &= -\lambda W_s + \lambda^2 [W_p + W_k - W_a], \end{aligned} \quad (7)$$

ahol

$$U_s = e \int v \delta \nu d\tau \quad (8)$$



a perturbációs potenciál középértéke az általa indukált sűrűségváltozásra,

$$U_p = \frac{1}{2} e^2 \iint \frac{\delta v(r) \delta v(r')}{|r - r'|} d\tau d\tau' \quad (9)$$

a sűrűségváltozás következtében beálló elektrosztatikus energiaváltozás és

$$U_k = \frac{5}{9} z_k \int \frac{(\delta v)^2}{r^{1/3}} d\tau \quad (10)$$

a kinetikus energia megváltozása. Az  $U_a$  egy korrekciós tag, mely a kicserélődési és korrelációs energiák változását veszi figyelembe. A  $W$  jelzett kifejezések arányosak az  $U$ -kal, csak a  $\lambda$ -t tartalmazó faktor van leválasztva belőlük.

A

$$\frac{d\eta_2}{d\lambda} = 0 \quad (11)$$

követelményből  $\lambda$ -nak  $\eta_2$ -t minimálissá tevő értéke  $\lambda_0$  meghatározható

$$\lambda_0 = \frac{1}{2} \frac{W_s}{W_p + W_k - W_a} \quad (12)$$

és vele az energia kifejezhető:

$$\eta_2 = -\frac{1}{2} \lambda_0 W_s = -\frac{1}{4} \frac{W_s^2}{W_p + W_k - W_a} \quad (13)$$

Mint *Gombás* kimutatja, a gyakorlatban előforduló esetekben, amikor  $W_p$  és  $W_k$  egyenlő előjelű, a  $W_a$  korrekciós energiatag elhanyagolható.

### 3. §. A HJ-molekula potenciálgörbéjének meghatározása a statisztikus perturbációs számítás segítségével

A gömbszimmetrikus negatív jód ion és a proton közötti kölcsönhatás két részből tehető össze: a proton és az elektronfelhő és a proton és az atommag kölcsönhatásából. Így tehát a perturbációs potenciál per elektron

$$v = \frac{e}{r} - \frac{Z e}{N \delta} = \frac{e}{\sqrt{\varrho^2 + \delta^2 - 2\varrho\delta \cos \vartheta}} - \frac{Z e}{N \delta} \quad (14)$$

lesz. Itt  $e$  a pozitív elemi töltés és  $\delta$  a magtávolság;  $\varrho$  és  $r$  egy  $P$  pontnak a  $J^-$ -ion magjától, ill. a protontól való távolságát jelöli és  $\vartheta$  a  $\varrho$  és  $\delta$  által az 1. ábrán látható módon bezárt szög.

Mivel a perturbálatlan  $J^-$ -ion gömbszimmetrikus elektronfelhővel rendelkezik, a (6) kifejezésben a szögekre való integráció könnyen elvégezhető és az elsőrendű perturbációs energiára az

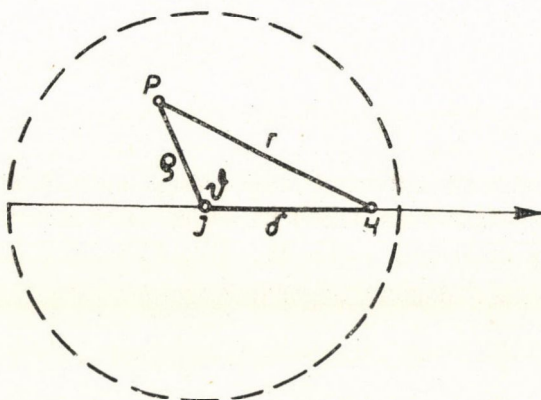
$$\eta_1 = \frac{Ze^2}{\delta} - 4\pi e^2 \mu^{*2} \left\{ \frac{1}{\xi} \int_0^{\xi_0} r(x) x^2 dx + \int_{\xi_0}^{\infty} r(x) x dx \right\} \quad (15)$$

kifejezést kapjuk, ahol  $\xi = \delta/\mu^*$ . Az  $\eta_1$  menetét a 3. ábrán láthatjuk.

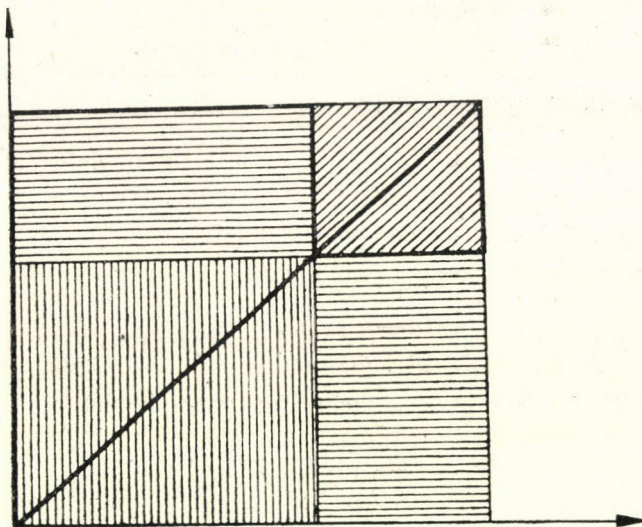
Könnyen belátható, hogy a perturbációs potenciálban levő állandó tag  $-(Z/N)e/\delta$  a másodrendű perturbációs energia számítása szempontjából elhanyagolható. Már említettük, hogy a sűrűségeloszlást nem befolyásolja és (5) felhasználásával kimutatható, hogy  $W_s$ -ben sem okoz változást elhagyása. Így a perturbációs potenciál alatt ezek után a

$$v' = \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + \delta^2 - 2\rho\delta \cos \vartheta}} \quad (16)$$

kifejezést fogjuk érteni.



1. ábra. Koordináták a HJ molekula elméletéhez.



2. ábra. Az  $I_1$ ,  $I_2$  és  $I_3$  integrálok kiszámításánál fellépő integrációs tartományok.



A másodrendű perturbációs energia számításánál lényeges egyszerűsödést jelent, hogy a kinetikus energia megváltozásából eredő energiatag a perturbációs energiának a sűrűségváltozásra való középértékével egyszerű összefüggésbe hozható. Tegyük be a (8) és (10) kifejezésekbe  $\delta v$  (4) alatti értékét, akkor egyszerű integrációk végrehajtása után kapjuk

$$W_k = \frac{1}{3} W_s. \quad (17)$$

A  $W_s$  kiszámításánál a szögekre ismét integrálhatunk és az integrációk végrehajtása után kapjuk

$$W_s = \frac{6\pi e^2 \mu^*}{5\kappa_k} \left\{ e^2 \frac{1}{\xi} \int_0^{x_0} x v^{1/3}(x) \log \frac{|\xi + x|}{|\xi - x|} dx - 2 v_0^2 \mu^2 \int_0^{x_0} v^{1/3}(x) x^2 dx \right\}. \quad (18)$$

A legnehezebb feladat az elektronsűrűség megváltozásából eredő elektrosztatikus energiacsökkenés tekintetbevétele, mert az integrálban szereplő reciproktávolság miatt csak sorfejtéssel oldható meg az integráció.

Fejtsük  $1/|r-r'|$ -t gömbfüggvények szerint sorba

$$\frac{1}{|r-r'|} = \sum_{n=0}^{\infty} K_n(r, r') P_n(\cos \omega), \quad (19)$$

ahol  $\omega$  az  $r$  és  $r'$  által bezárt szög és

$$K_n(r, r') = \begin{cases} \frac{r^n}{r'^{n+1}} & r < r', \\ \frac{r'^n}{r^{n+1}} & r' < r. \end{cases} \quad (20)$$

(19)-höz hasonlóan nyerhető, hogy

$$v(r) = \frac{e}{\sqrt{q^2 + \delta^2 - 2q\delta \cos \vartheta}} = e \sum_{n=0}^{\infty} K_n(q, \delta) P_n(\cos \vartheta), \quad (21)$$

ahol  $K_n(q, \delta)$  (20)-hoz hasonlóan van definiálva.

Vegyük tekintetbe, hogy a gömbfüggvények összeadási theorema szerint

$$P_n(\cos \omega) = \sum_m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\cos \vartheta') P_n^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} e^{-im\varphi'} \quad (22)$$

(19)–(22)-t (9)-be téve és a szögekre integrálva kapjuk

$$W_p = \frac{18\pi^2 e^4}{25\kappa_k^2} \{I_1 - 2v_0 I_2 + v_0^2 I_3\}, \quad (23)$$

ahol

$$I_1 = 8e^2 \mu^{*3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2} H_n \quad (24)$$

és

$$\begin{aligned}
 H_n = & \left( \frac{1}{\xi} \right)^{2n+2} \int_{x=0}^{\xi} \nu^{1/3}(x) x^{2n+2} dx \int_{x'=x}^{\xi} \nu^{1/3}(x') x' dx' + \\
 & + \frac{1}{\xi} \int_{x=0}^{\xi} \nu^{1/3}(x) x^{2n+2} dx \int_{x'=\xi}^{x_0} \nu^{1/3}(x') x'^{-2n} dx' + \\
 & + \xi^{2n} \int_{x=\xi}^{x_0} \nu^{1/3}(x) x^{-2n} dx \int_{x'=\xi}^x \nu^{1/3}(x') x' dx',
 \end{aligned} \quad (25)$$

ahol minden integrált kétszer vettünk, hogy az integrálási tartomány egész területére integráljunk.

Integráljainkat a benne szereplő két  $K_n$  függvény definíciójának megfelelően hat részre kellett felbontanunk, melyek közül azonban csak három független, a másik három velük kifejezhető. A 2. ábrán az integrációs tartományokat rajzoltuk fel s az egyenlő értékű tartományokat azonos árnyékolással tüntettük fel. Az általunk választott három integrációs tartomány határait vastagon kihúztuk.

Hasonlóan nyerjük

$$\begin{aligned}
 I_2 = 4e\mu^{*4} \Big\{ & 2 \frac{1}{\xi} \int_0^{\xi} \nu^{1/3}(x) x^2 dx \int_x^{\xi} \nu^{1/3}(x') x' dx' + \frac{1}{\xi} \int_0^{\xi} \nu^{1/3}(x) x^2 dx \int_{\xi}^{x_0} \nu^{1/3}(x') x' dx' + \\
 & + \int_{\xi}^{x_0} \nu^{1/3}(x) dx \int_0^{\xi} \nu^{1/3}(x') x'^2 dx' + \int_{\xi}^{x_0} \nu^{1/3}(x) dx \int_{\xi}^x \nu^{1/3}(x') x'^2 dx' + \\
 & + \int_{\xi}^{x_0} \nu^{1/3}(x) x dx \int_{\xi}^x \nu^{1/3}(x') x' dx' \Big\}.
 \end{aligned} \quad (26)$$

Végül

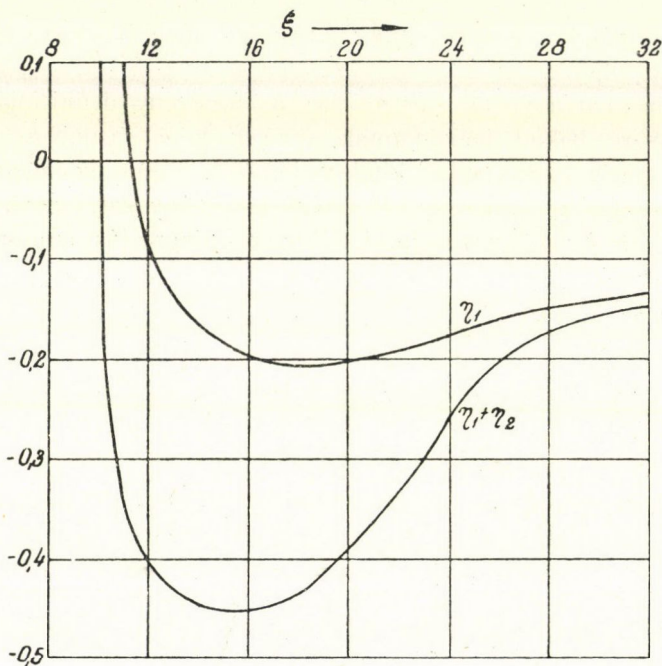
$$\begin{aligned}
 I_3 = 8\mu^{*5} \Big\{ & \int_0^{x_0} \nu^{1/3}(x) x^2 dx \int_x^{\xi} \nu^{1/3}(x') x' dx' + \\
 & + \int_0^{x_0} \nu^{1/3}(x) x^2 dx \int_{\xi}^{x_0} \nu^{1/3}(x') x' dx' \Big\}.
 \end{aligned} \quad (27)$$

Ezekben a formulákban is, ahol csak lehetett a kiszámítandó integrálok számát a minimálisra redukáltuk. Az  $I_1$ -ben szereplő végtelen sor kiszámítása volt a legnehezebb feladat. Hogy elegendő pontossággal kapjuk eredményeinket, a végtelen sor 9 tagját számítottuk ki pontosan, a hátralevő sort pedig



egy megfelelő hányadosú geometriai sorral approximáltuk.  $I_2$  és  $I_3$  kiszámítása semmi nehézséget nem okozott, mert bennük végtelen sor nem fordul elő és a bennük szereplő integrálok végesek.

A HJ-molekula energiáját  $E = \eta_1 + \eta_2$ -t az integráloknak különböző magtávolságokra való kiszámításával mint a magtávolság  $\delta$  függvényét meg lehet állapítani.  $E$ -nek mint  $x = \delta/\mu^*$  függvényének lefutását a 3. ábrán mutatjuk be.  $E$  minimuma megfelel a molekula stabilis egyensúlyi helyzetének. Az ábrán látható, hogy az energiaminimum  $x = 15,3$ -nál, azaz  $\delta_0 = 1,91 \text{ \AA}$ -nál van.  $\delta_0$  a HJ-molekula magtávolsága az alapállapotban. A számított magtávolság a tapasztalati értéktől,  $\delta_0 = 1,60 \text{ \AA}$ -tól 19%-kal különbözik.



3. ábra. A HJ molekula energiája a magtávolság függvényében. Abszcissa: magtávolság a dimenzió nélküli  $\xi$ -egységekben. (Lásd a szöveget.) Ordináta: energia  $e^2/a_0$  egységekben.

Az energiaminimum értéke a HJ molekula disszociációs energiájával egyenlő, azaz azzal az energiával, mely szükséges ahhoz, hogy a molekulát egy  $J^-$  és egy  $H^+$  ionra disszociáljuk. Ezt az energiát  $D(H^+; J^-)$ -val jelöljük és az értékére vonatkozólag kapjuk, hogy  $D(H^+; J^-) = 12,25 \text{ eV}$ . A tapasztalati disszociációs energiát ezzel közvetlenül nem lehet összehasonlítani, mert ez az az energia, amely szükséges, hogy a molekulát egy semleges  $J^-$  és egy semleges H-atomra disszociáljuk; ennek értéke  $D(H; J) = 2,75 \text{ eV}$ . Ha a H-atom ionizációs energiáját  $I(H)$ -val és a J-atom elektronaffinitását  $A(J)$ -val jelöljük, akkor  $D(H^+; J^-)$ -t az  $I(H) = 13,61 \text{ eV}$  és  $A(J) = 3,22 \text{ eV}$  tapasztalati

értékek behelyettesítésével a következő körfolyamatból számíthatjuk ki

$$D(H^+; J^-) = D(H; J) + I(H) - A(J).$$

Ebből adódik  $D(H^+; J^-) = 13,14 \text{ eV}$ , tehát a számítottnál kereken 7%-kal nagyobb érték.

#### 4. §. A dipólmomentum kiszámítása

Egy további állandó, melyet az itt leírt perturbációs eljárással egyszerűen ki lehet számítani, a HJ molekula dipólmomentuma. Ha a pontszerűnek tekintett ionoktól származó dipólmomentumot  $m_0$ -val és az elektronfelhő deformációjából, azaz polarizációjából keletkező (röviden: indukált) dipólmomentumot  $m'$ -vel jelöljük, akkor a HJ-molekula dipólmomentuma a következő

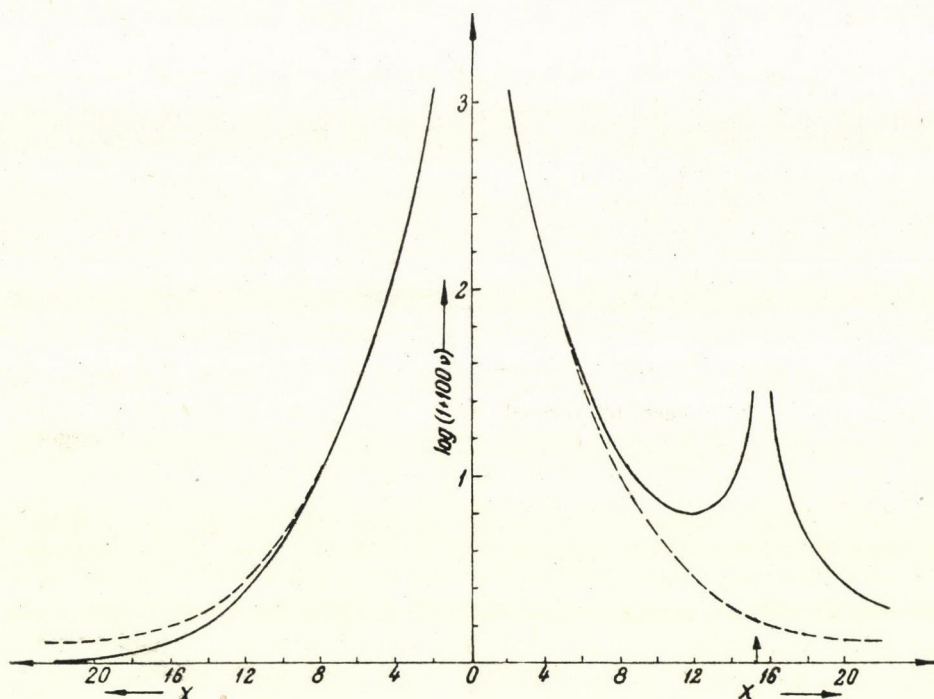
$$m = m_0 - m', \quad (28)$$

ahol

$$m_0 = e\delta \quad \text{és} \quad m' = \int z \delta v \, dv = \int r \cos \vartheta \delta v \, dv. \quad (29)$$

$m'$ -re  $\delta v$  behelyettesítésével és a szögekre való integrálással az

$$m' = \frac{4\pi e^2}{5\alpha_k} \lambda \mu^{*2} \left\{ \frac{1}{x_0^3} \int_0^{x_0} x^4 v^{1/3}(x) \, dx + \int_{x_0}^{x_0} x v^{1/3}(x) \, dx \right\} \quad (30)$$

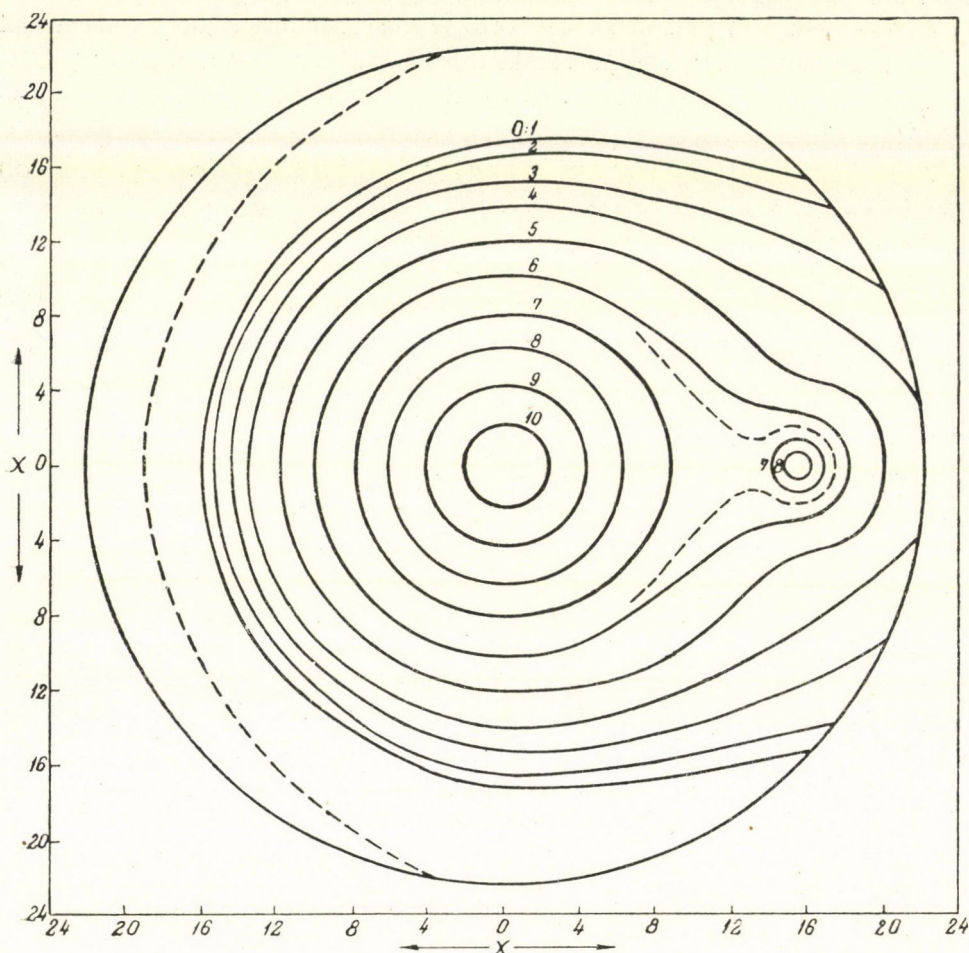


4. ábra. A HJ-molekula sűrűségeloszlása a magokat összekötő egyenes mentén. A  $J^-$ -ion atommagja a koordinátarendszer kezdőpontjában van. A proton abszcisszáját nyíllal jelöltük be.



kifejezést kapjuk. Az itt előforduló integrálok az energiafüggvény kiszámításánál is jelentkeznek úgy, hogy  $m'$  kiszámításához további integrálok tabellázása nem szükséges.

$m$  számított értékének a tapasztalattal való összehasonlításakor a következő nehézség merül fel.  $m_0$  és  $m'$   $6 \cdot 10^{-18}$  cgs nagyságrendűek és majdnem egyforma nagyok,  $m$  tapasztalati értéke pedig  $0,30 \cdot 10^{-18}$  cgs tehát kerekén 20-szor kisebb mint  $m_0$  és  $m'$ , melyek különbségeként  $m$ -nek adódnia kellene.  $m$  esetében a megegyezés kielégítő, mert a számított érték az elméletileg meghatározott egyensúlyi helyzetben  $m \cong -0,17 \cdot 10^{-18}$  cgs-nek adódik.



5. ábra. A HJ-molekula sűrűség nivógörbéi. (Részletesen lásd a I. táblázatban.)  
A magtávolságot a dimenzió nélküli  $x$ -egységekben mértük fel.  
A koordináta rendszer kezdőpontjában a  $J^-$ -ion magja van.



### 5. §. A sűrűségeloszlás a HJ molekulában

A dipólus nyomaték alakulása szempontjából, de egyébként is nagy érdeklődésre tarthat számot a sűrűségeloszlás alakulása. (1), (7), (8), (11) és (17) segítségével a megváltozott sűrűségeloszlás könnyen előállítható. Az elméletileg meghatározott magtávolság esetére a sűrűségeloszlás alakulását a 4. ábra adja meg a magokat összekötő tengely mentén. A  $J^-$ -ion centruma a koordináta-rendszer origójában van, a proton helyét nyíl jelöli. Ordinátánkra a sűrűséget pszeudologaritmikus skálában mértük fel, hogy a nagy sűrűségkülönbséget, mely a  $J^-$ -ion centrumában lévő nagy sűrűségű helyek és szélén lévő kis sűrűségű helyek következtében keletkezik, kiegyenlítsük. Jól látható az ábrán, hogy a  $J^-$  elektronfelhőjébe behatoló proton az elektronok jelentős részét magához vonja s az elektronok a  $J^-$ -ionnak a protonnal ellentétes oldaláról vonódnak el. A kísérleti dipólusnyomaték igen kis értékéből látható, hogy a proton körül kialakuló elektronfelhő a proton töltését részben vagy egészen kompenzálja. Így a HJ molekula inkább a semleges atomokból álló homopoláros molekulákkal mutat rokonságot. A dipólusnyomatékra általunk kapott  $-0,17 \cdot 10^{-18}$  cgs egységnyi érték arra mutat, hogy az általunk használt modellben a proton a  $J^-$ -iont oly erősen polarizálja, hogy az elektronfelhő a proton töltését túlkompenzálja. Kísérletileg sajnos nem nyílik mód a dipólusnyomaték előjelének meghatározására és így nincs módunkban eldönteni ezen az úton, hogy a valóságnak megfelel-e a dipólusnyomaték negatív előjele. A proton és a J atommagja között egy aránylag nagy elektronsűrűségű terület, ú. n. elektronhid alakul ki, mely nagymértékben felelős a HJ molekula stabilizálásáért, mint az általában homopoláros kötéseknel ismeretes. Az elektronhid és az elektroneeloszlással kapcsolatos egyéb tények még részletesebben tanulmányozhatók az 5. ábrán. Ezen az ábrán az egyenlő sűrűségű helyeket összekötő görbéket, az ú. n. nívógörbéket rajzoltuk meg. Az általunk használt eljárás a következő volt. A perturbálatlan  $J^-$ -ion nívógörbéi az origó köré rajzolható körök. Az origóból kiindulva ekvidisztans közőkkel köröket rajzoltunk (ezek az ábrán nem láthatók) és ezeknek a deformációját vizsgáltuk. Az I. táblázatban adjuk meg az elektronsűrűség értékét az egyes körök mentén. A legelső 0-val jelölt görbe a perturbálatlan  $J^-$ -ionban a határsugárral húzott kör, melynek mentén a sűrűség értéke a kicsiny, de véges  $r_0 = 0,003074 \text{ } 1/a_0^3$  értéket veszi fel. Ennek közelében a sűrűség a  $J^-$ -ion határsugara által meghatározott gömbnek csaknem a fele térfogatában az elektronsűrűség állandó (igen kissé változik). A proton perturbációja ezt a sűrűségeloszlást úgy

I. táblázat

A sűrűség-nívó görbéket jellemző adatok

A görbe sorszáma	Elektronsűrűség $1/a_0^3$ egységben
0	0,003074
1	0,0033
2	0,0040
3	0,0057
4	0,0093
5	0,0174
6	0,0375
7	0,0932
8	0,292
9	1,29
10	11,61



változtatja meg, hogy erről a konstans sűrűségű térfogatrészről az elektronok legnagyobb részét magához vonzza. Ez nyilvánul meg szembetűnően abban, hogy a nívógörbék, melyek a perturbálatlan  $J^-$  ionban egyenlőközűek voltak, a HJ molekulában erősen deformálódnak és a protonnal átellenes oldalon a  $J^-$  ion centruma felé összerolldnak. A szaggatott vonallal behúzott görbék segéd nívógörbék, melyekkel az előzőleg említett nívógörbékkel kevésbbé fedett területeken óhajtottuk a sűrűség alakulás részleteit vázolni.

## 6. §. Az eredmények értékelése

Tekintve, hogy számításaink alapjául az a nagyon leegyszerűsített feltevés szolgált, hogy a kötés tiszta ionkötés, eredményeink nagyon kielégítőnek mondhatók. A számított állandók megegyezése a tapasztalatiakkal a disszociációs energia és az indukált dipólmomentum esetében nagyon jó, a magtávolság esetében valamivel rosszabb.

A kapott eredmények azt mutatják, hogy az alapul vett statisztikus modell és a statisztikus perturbációszámítás igen jól beválnak, az utóbbi a nehéz atomok és ionok polarizálhatóságainak számításánál is.

A  $J^-$ -ionnak általunk alapul vett, korrelációval bővített statisztikus modelljében az elektronsűrűség, mint ismeretes, csak a  $\nu_0 = 0,003074 \text{ } 1/a_0^3$  szélső értékig fut ki és  $\nu_0$ -nál kisebb értéket nem vehet fel. Ennek következtében az itt alapul vett modellben a  $J^-$ -ionnak véges sugara van, melyen kívül az elektronsűrűség nulla. Tehát a határfelület a nem perturbált  $J^-$ -ion esetében gömbfelület. Ebben a közelítésben a perturbált  $J^-$ -ion számára is megtartottuk ezt a határfelületet, de ez exakte nem érvényes és csak azért engedhető meg, mert az ebből adódó hiba kicsi. A HJ-molekula itt vázolt elméletének továbbfejlesztésénél figyelembe kell venni, hogy a perturbált  $J^-$ -ion határoló felülete nem gömbfelület.

Az elmélet továbbfejlesztésénél az lenne a következő lépés, hogy a kötetést nem tekintenénk tiszta ionkötésnek, hanem egy homöopoláris kötéspotenciált is feltételeznénk.

## IRODALOM

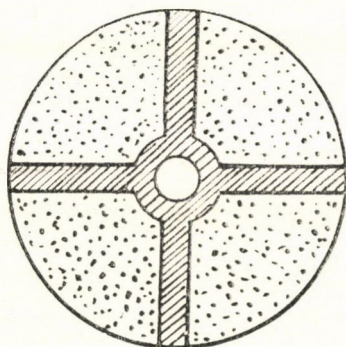
1. Lásd pl. *P. Gombás*: Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik, Birkhäuser, Basel, 1950. 89 és 193.
2. Lásd pl. *P. Gombás*: Die statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Wien, Springer Verl. 1949.
3. Lásd pl. *J. G. Kirkwood*, Phys. Zs., 33, (1932) 259. *P. Gombás* és *T. Neugebauer*, Zs. f. Phys. 92, (1934) 375.
4. *P. Gombás*: Zs. f. Phys. 121, (1943) 523.
5. *P. Gombás*: Zs. f. Phys. 122, (1944) 497.
6. Handbuch der Physik, Bd. XXIV/2, (1933) 728.
7. Handbuch der Physik, Bd. XXIV/2, (1933) 1031.

# SZELÉNFÉNYELEMOK ÉRZÉKENYÍTÉSE AZ INFRAVÖRÖSRE HIGANYGŐZZEL\*

SELÉNYI PÁL  
akadémikus

Eötvös Loránd Tudományegyetem Fizikai Intézete, Budapest

1. A higanygőznek a szelénegyenirányítóra és szelénfényelemre gyakorolt hatásáról szóló legutóbbi két dolgozatomban<sup>1,2</sup> közöltem, hogy a higanygőz hatására a szelénfényelem üresjárási feszültsége fokozatosan nullára csökken, ellenben rövidzárási árama gyakorlatilag nem változik. Ezt a megállapítást annak az egyetlen ilyen irányú kísérletnek alapján tettem, amelyet még 1944. január havában a *Székely Miklós* mérnök villamossági vállalatának egyenirányító üzemében, illetve laboratóriumában igen kezdetleges körülmények



1. ábra

Szelénegyenirányítóból készült fényelem

(A pontozott felületrésztől a fedőelektroda jórészt le van törölve)

között végeztem. Ott az egyenirányítógyártás az általam kidolgozott eljárás szerint akkor már több mint két éve folyt. Fényelemek gyártására ugyan nem voltunk berendezkedve, azonban szelénegyenirányító-tárcsából könnyen készíthetünk szelénfényelemet a következő módon: A tárcsát, pl. villamos főzőlapon, kb. 110–120° C-ra felmelegítve, rajta a fedőelektrodát megolvasztjuk s vattacsomóval óvatosan letöröljük úgy, hogy a fémbevonatnak még éppen jól látható nyoma maradjon. Ez a vékony, szakadozott, de egészben véve vezetőleg összefüggő fémbevonat alkotja fényelemünk fényátbocsájtó, elülső elektrodáját. A jobb áramvezetés kedvéért célszerű az eredeti fémbevonatból

\* Bemutatta az 1952. dec. 1-én tartott felolvasó ülésen.

Megjelent először angol nyelven, Acta Physica 3, 65, 1953.



— alkalmas maszkkal való lefödéssel — egy központi gyűrűalakú s néhány sugármenti részt nem letörölni (Ld. az 1. ábrát). Az így készült fényelemek érzékenysége ugyan tetemesen, 5—10-szer kisebb, mint a normális gyártmányoké, belső ellenállásuk is kisebb szokott lenni, azonban kísérleti célra igen jól alkalmasak. (A történelmi érdekesség kedvéért megemlítem, hogy az 1930-tól kezdve forgalomba hozott Tungsram fényelemek is eleinte ezzel az eljárással készültek, amelyet *Bruno Lange* német fizikustól vettünk át.)

A szóbanforgó kísérletet ugyanazzal a berendezéssel végeztem, mint amellyel a higanygőznek a szelénegyenirányítóra való hatását vizsgáltam. Egy a fenti eljárással készült fényelemet helyeztem el az üveglablakkal ellátott fémdobozba, amelyen szobahőmérsékleten higanygőzzel telített levegőt áramoltattam keresztül; a fényelemet 30 cm távolságból 20 W-os Krypton-égővel megvilágítottam s az öblítés folyamán időnként megmértem a tárcsának vissz-áramát állandó 1 V zárófeszültségnél és az általa szolgáltatott fotofeszültséget, kb. 400  $\Omega$  belső ellenállású 17 mV mérési határú műszerrel. A kísérlet eredményét az alanti táblázat tartalmazza.

1. táblázat

$t$	$i_z$	$E$	$r_z$
0 perc	1 mA	6,5 mV	1000 $\Omega$
50	2,4	5,5	416
85	3,8	4,0	236
105	6,0	2,3	166
145	8,2	0,4*	122

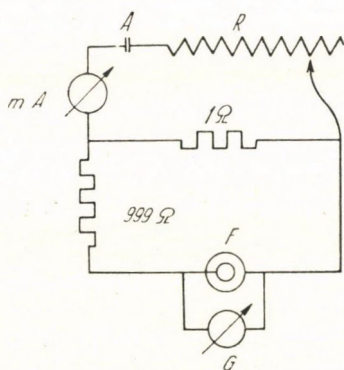
\* Lámpatávolság: 10 cm

Látható, hogy a higanygőzzel való öblítés folyamán az  $i_z$  vissz-áram növekszik, vagyis az  $r_z$  zárófeszültség csökken és egyidejűleg a fényelem fotofeszültsége is zérus felé közeledik. Midőn az így „tönkretett“ fényelemet pusztá kíváncsiságból az említett 20 W-os égőnek egészen burájáig közelítettem és 4  $\Omega$  ellenállású 25 mA mérési határú műszerrel összekötöttem, azon nagy meglepetésemre 4,2 mA fotoáramot (rövidzárási áramot) mértem. Miután két ugyanilyen, de higannyal nem kezelt fényelem ugyanígy megvilágítva 4, illetve 7 mA, tehát ugyanilyen nagyságrendű fotoáramot adott, feltételezhettem, hogy a higannyal való kezelés a fényelem primér fotoáramát, a rövidzárási áramot gyakorlatilag nem változtatja meg.

2. E kísérleteknek újbóli megismétlésére Dr. *Bosch* német fizikusnak a 725. sz. B. I. O. S. jelentés 33. oldalán található és 1. alatti dolgozatomban már idézett közlése adott indítékot. Dr. *Bosch* egyetlen alkalommal megfigyelte, hogy a higanygőz a szelén fotocellát átmenetileg az infravörösre, egészen

11.000 Å-ig érzékenyítette, azonban e jelenséget sem megismételni, sem megmagyarázni nem tudta.

Kísérleteinket ugyanavval a berendezéssel végeztük és ugyanúgy, mint a fent említett első kísérletet, avval az egyetlen különbséggel, hogy a higanygőzzel való kezelés alatt a fényelemet olyan színszűrőn keresztül világítottuk meg, amely csakis az infravörös sugarakat (vagy legfeljebb még a színekép szélső vörös sugarait) bocsátja át és mértük az ezen sugarak által keltett fotoáramot, illetve fotofeszültséget. Rögtön az első kísérletek, amelyeket még ez év február havában végeztünk, igazolták Dr. Bosch megfigyelését: a higanygőz hatására a fényelemek vörös és infravörös érzékenysége valóban tetemesen megnőtt. Az első kvalitatív megfigyelések után pontosabban megvizsgáltuk az érzékenyítési folyamatot, nevezetesen a rövidzárási áramnak és a kapcsolófeszültségnek (üresjárási feszültségnek) időbeli változását. A rövidzárási áram mérése az ú. n. áramkompenzációval történt; mivel ez az eljárás a közkezen forgó szakirodalomban, pl. *Kohlrausch* közismert könyvében sincs megemlítve,



2. ábra

Fényelem rövidzárási áramának mérése áramkompenzációval

talán nem lesz felesleges ezt röviden ismertetni. Legyen egy áramforrásnak elektromotoros ereje (üresjárási feszültsége)  $E$  akkor ha belőle  $i$  áramot veszünk ki, a kapcsolófeszültség

$$e = E - i \cdot r_b$$

értékre csökken, ahol  $r_b$  az áramforrás belső ellenállása. Ha az áramforrást rövidre zárjuk, akkor az  $i_0 = \frac{E}{r_b}$  rövidzárási áramot szolgáltat és kapcsolófeszültsége zérusra esik. Egy áramforrást, pl. egy akkumulátort azonban nem kívánatos rövidre zárni, mert a rövidzárási tönkre teheti. Ezt kerülhetjük el az ú. n. áramkompenzációs eljárással. Az elemen külső áramforrásból közbeiktatott ellenálláson keresztül ugyanolyan irányú áramot vezetünk át, mint aminőt maga az elem is szolgáltat s az áram erősségét addig változtatjuk, míg az elem kapcsolófeszültsége zérus lesz. Világos, hogy az elemen ekkor



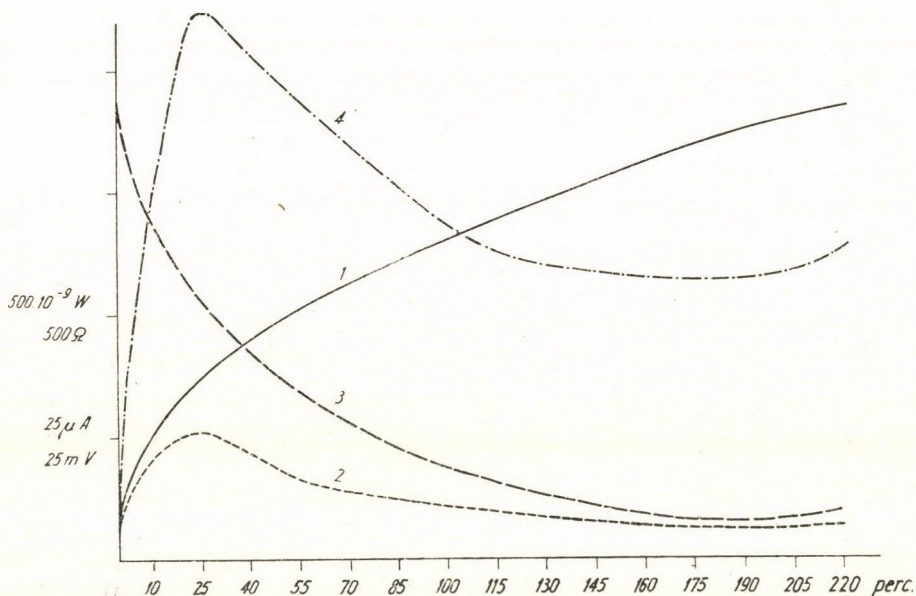
keresztülfolyó áram erőssége rövidzárási árammal egyenlő. Ezt a mérési eljárást még tovább is lehet fejleszteni. Ha ugyanis az elemen nem az egész áramot, hanem annak ismert törtrészét vezetjük át, amit áramelágazással hozunk létre, akkor a mérésre sokkal kevésbé érzékeny műszert használhatunk. Ezt az általunk alkalmazott kapcsolást tünteti fel a 2. ábra. Itt  $F$  a fényelem, melynek rövidzárási áramát óhajtjuk megmérni. E célból az  $A$  akkumulátorból az  $R$  változtatható ellenálláson keresztül áramot veszünk ki, melynek erősségét az  $mA$  milliampermérővel mérjük. A fényelemen az ábrán feltüntetett áramelágazás segítségével az áram  $1/1000$  részét vezetjük át és  $R$ -t addig változtatjuk, míg a fényelemhez párhuzamosan kapcsolt  $1000\ \Omega$  ellenállású  $3,3 \times 10^{-8} A$  osztályrész érzékenyséű  $G$  galvanometer nullát mutat. Akkor ahány milliampert olvasunk le a milliampermérőn, annyi a fényelem rövidzárási árama mikroamperekben\*. A fényelem kapocsfeszültségét ugyanevvel a galvanométerrel mértük, még  $10.000\ \Omega$ -ot kapcsolva eléje, ennek folytán a mért érték gyakorlatilag megegyezett az üresjárási feszültséggel. A fényelem megvilágítása egy kis vetítőkészülékkel történt, aminőt álló filmkockák vetítésére szokás használni, s a fény útjába egy 70. számú Wratten szűrőt helyeztünk, amely a látható színeknek kb.  $660\ m\mu$ -on túl fekvő részét és az infravörös sugarakat bocsátja át.

Az érzékenyítés időbeli lefolyását a 3. ábra tünteti fel. Látható (1. görbe), hogy a fotoáram erőssége, vagyis a fényelem infravörös érzékenysége a higanygőz hatására eleinte gyorsabban, majd lassabban, de állandóan nő; a foto-feszültség (2. görbe) eleinte nő, 20—25 perc alatt eléri legnagyobb értékét, majd csökken s a kísérlet végén, kereken négyórai kezelés után körülbelül eredeti értékét mutatja. Ez a viselkedés megmagyarázható abból az ismert tényből, hogy a fényelem kapocsfeszültsége nem más, mint az ohmikus feszültségesés, amit a fényelemben az áteresztő irányban visszafolyó fotoáram hoz létre. Már pedig a fényelem belső ellenállása a higanygőz hatására kezdettől fogva állandóan csökken, ( $940\ \Omega$ -ról  $75\ \Omega$ -ra) amint az a 3. görbén látható, és pedig rohamosabban és nagyobb mértékben, mint ahogy a fotoáram nő,

\* Talán nem lesz érdektelen ennek a mérési eljárásnak további módosítását és alkalmazását ismertetni. Ha ugyanis kompenzáló áram gyanánt egy izzólámpa áramfogyasztásának ismert törtrészét használjuk és a fényelemet ugyanevvel a lámpával világítjuk meg, akkor — mivel a fényelem rövidzárási árama a megvilágítással arányos — ebből következik, hogy a kikompenzálás akkor következik be, midőn a lámpa áramerőssége, vagyis adott feszültségnél a *wattfogyasztása* és a *fényereje* adott viszonyban vannak. Ha a lámpát Ulbricht-gömbben helyezzük el, ilymódon egyetlen méréssel a lumen/watt viszonyt meghatározhatjuk, illetve a lámpákat specifikus áramfogyasztásuk szerint osztályozhatjuk. Ezt a mérési eljárást még a harmincas években a Tungsram Kutató Laboratóriumban dolgoztam ki és egy 1932. december 20-án kelt, a második világháborúban elpusztult munkatársammal, *Rosenberg Vilmos*sal közös „Über betriebsmässige, objektive Photometrie von Glühlampen“ című sokszorosított jelentésünkben ismertettem. Innen vette azt át *Rudolf Sewig* több egyéb, a Tungsram Laboratóriumból kikerült újításnak ismertetésével együtt „Objektive Photometrie“ (Springer, Berlin, 1935.) c. könyvébe. (Ld. 34. oldal)



ennélfogva a fotofeszültség időbeli változása, (nevezetesen a maximum kialakulása) e két ellentétes folyamat eredményeként jön létre. Hasonló viselkedést mutat a fénylelem teljesítménye: eleinte rohamosan nő, 20—25 perc alatt eredeti értékének 30-szorosát éri el, majd pedig meredek esés után lassan újra növekszik (Ld. a 4. görbét).



3. ábra

Az infravörös-érzékenyítés időbeli lefolyása.

1. görbe rövidzárási áram ( $I_0$ ). 2. görbe üresjárási feszültség ( $E$ )  
3. görbe belső ellenállás ( $r_0$ ). 4. görbe teljesítmény ( $W$ )

3. Az infravörös érzékenység ezen kifejlődésével egyidejűleg természetesen a fénylemnek összérzékenysége, vagyis a spektrálisan szét nem bontott izzó fény által keltett fotoáram erőssége is megnő. Így például a 11. sz. fénylemen 1 óra 10 percnnyi kezelés után kb. 6%-os, a 15. sz. fénylemen ellenben mindössze 30 percnnyi kezelés után majdnem 40%-os növekedést tapasztalhatunk. Ez értékeknek nagyfokú divergenciája, valamint általában a kísérleteinkhez használt fénylemek különböző viselkedése főleg onnan ered, hogy az elülső elektróda letörlésénél visszamaradt fémbevonat nagyon különböző vastagságú lehet. A következő feladat lenne az így érzékenyített fénylemek színérzékenységi görbéjének meghatározása. Ez a munka jelenleg folyamatban van. Első tájékoztatásul szolgálhatnak azok az adatok, amelyeket különböző színszűrőkkel nyertünk. Ilyenek voltak: egy sorozat  $350\text{ m}\mu$ — $1100\text{ m}\mu$ -ig terjedő, kicsiny sáv szélességű ú. n. interferenciás szűrő, egy szelén-színszűrő, amely üveglapra vákuumban reáparologtatott kb. 0,5 mm vastag amorf szelén-rétegből áll s amely a szélső vöröstől kezdve az infravörös sugarakat majd-



nem gyöngítetlen engedi át és jódnak szénkénes oldata, amely kellő töménységben csakis az infravörös sugarakat bocsájtja át.

A 2. táblázatban példaképen közöljük az említett szűrőkkel a 7. számú higannyal kezelt és a 14. számú kezeletlen fénylemen nyert mérési sorozatot.

2. táblázat

Szűrő	galvanometer kitérés		7. sz. : 14. sz.
	7. sz.	14. sz.	
350 $m\mu$ i. sz.	5	5	1,00
400	17	20	0,85
450	47	52	0,90
500	55	63	0,87
550	255	255	1,00
600	249	245	0,98
650	371	396	0,94
700	292	288	0,99
800	89	30	2,97
900	42	13	3,23
1000	122	10	12,20
1100	54	7	7,72
szelén	212	13	16,30
CS <sub>2</sub> —J oldat	185	0	—

Hogy az összehasonlítás megejthető legyen, a két fénylemnek a fényforrástól való távolságát úgy választottuk meg, hogy az 550  $m\mu$  szűrővel nyert galvanometerkiütések egymással egyenlők legyenek és ezen helyzeten nem változtatva olvastuk le a többi szűrőhöz tartozó galvanometer-kilengéseket. A közölt számok eszerint ú. n. „nyers” adatok, vagyis nincsenek átszámítva egyenlő nagyságú beeső fényenergiára. Ennélfogva belőlük a két fénylem színérzékenységi görbéje nem szerkeszthető meg, ellenben az összehasonlításra természetesen így is alkalmasak. A közölt számokból kiderül, hogy a higannyal való kezelés folytán a fénylemek érzékenysége a színek kék vége felé valamelyest csökken, a vörösben és az infravörösben ellenben tetemesen megnő, és legnagyobb értékét — úgy látszik — 1000  $m\mu$  körül (jelen esetben az eredetinek 12,2-szeresét) éri el. Hasonló eredményeket nyertünk több más higannyal kezelt fénylemmel is. Megemlítésre érdemes az is, hogy a nem kezelt fénylemek, amelyeknek határ-hullámhosszát kb. 800  $m\mu$ -ban szokás megadni, érzékenyek bizonyultak még az 1100  $m\mu$  hullámhossznál is, jó

egyezésben avval a tapasztalattal, hogy a fotocellák és fénylemek érzékenysége a hosszú hullámok felé haladva asszimptotikusan közeledik a zérus felé. Végül a táblázat utolsó két sora szummárisan az infravörös érzékenységre ad felvilágosítást. (Ezen méréseknél természetesen a megvilágítás erőssége sokkal kisebb volt, mint a közel monokromatikus interferenciás szűrőkkel végzett méréseknél, mert különben a galvanométer messze a skálán túl kilengett volna.) Mint látható a szelén-színszűrő fényében a higannyal való kezelés az érzékenységet 16,3-szorosára növeli, azonban ebben a fényben, mint említettük, a színekép szélső vörös sugarai is szerepelnek. Ha a látható sugarakat (a jó szénkénes oldatával) egészen kizárjuk, akkor az utolsó számsor tanúsága szerint a kezeletlen fénylem semmi érzékenységet nem mutat (ennél a megvilágítási erősségnél) szemben a higannyal kezelt fénylem tetemes érzékenységgel. Hogy az infravörös érzékenység tekintetében mit lehet elérni, arra nézve a 3. táblázat adatai nyújtanak felvilágosítást.

3. táblázat

Fénylem száma	fotoáram (mA)		infravörös érzékenység
	fehér fényre	infravörös fényre	
1.	28	7	25,0%
3.	100	10	10,0%
6.	31	5	16,1%
7.	80	15	18,8%
8.	80	5	6,2%
9.	74	12	16,5%
10.	87	7	8,0%
11.	75	11	14,5
Konverta kezeletlen	100	0	—
Konverta l. kezelt	100	10	10%

A táblázatban foglalt méréseket egy sereg általunk a fenti módon egyenirányítókából készített és higannyal érzékenyített fénylemen végeztük, jó szénkénes oldatával, mint infravörös szűrővel és kis ellenállású miliampermérővel, mint mérőműszerrel. Látható, hogy ezek a kísérleti fénylemek egymástól összérzékenységre és infravörös érzékenységre is meglehetősen különböznek; az utóbbinak közepes értékére ezen mérésekből 14,4% adódik.

4. Az eddig közölt kísérletek és mérések olyan fénylemekre vonatkoznak, amelyeket a fent ismertetett módon: a fedőelektrodának „letörlésével” állítottunk elő. A higannyal való érzékenyítés folyamatát azonban normális



gyártmányú, kész fényelemeken is végre lehet hajtani.\* Ezeknek fedőelektrodája tudvalevőleg katódporlasztással felvitt igen vékony fényátbocsájtó arany vagy platinahártya. Ha egy ilyen fényelemet higanygőz hatásának teszünk ki, a higanygőz ezeken a vékony fémhártyákon átdiffundál és az érzékenyítési folyamat a fentihez hasonló módon és időben folyik le. A 3. táblázat utolsó két sorának adatai szerint, amelyek egy hazai, „Konverta” gyártmányú fényelemre vonatkoznak, ilyen utólagos kezeléssel ezen is kereken 10%-ra rugó infravörös érzékenységet érhetünk el. Egyetlen kísérlettel arról is meggyőződünk, hogy ha magát a szelénbevonatot tesszük ki (a második hőkezelés után) a higanygőz hatásának és azután visszük rá katódporlasztással a fedőelektrodát, akkor is infravörösre érzékeny fényelemet nyerünk. Hogy vajjon gyártási szempontból ez-e a helyesebb eljárás avagy a kész fényelemek érzékenyítése, erre csak további kísérletek adhatnak végleges választ. Ennek és egyéb részletkérdéseknek tisztázása, valamint e vizsgálatoknak különböző irányokba történő folytatása folyamatban van.

5. Történelmi érdekesség szempontjából megemlítem, hogy a harmincas évek elején, midőn az Egyesült Izzó Kutató Laboratóriumában a „Tungsram” szelénfényelemek gyártása az én kezdeményezésemre és dr. Vészi Gábor munkatársam kitartó munkája eredményeképpen már javában folyt, a „British Osram” Wembley-i laboratóriuma, amellyel tapasztalatcserében állottunk, azzal a kéréssel fordult a vállalathoz, hogy a fényelemek gyártási eljárását közöljük velük. Ez meg is történt. Ennek ellenére a Wembley-i laboratóriumban nem tudtak kifogástalan minőségű fényelemet gyártani és — mint ahogy utólag értesültünk — főleg a fényelemek állandóságával voltak nehézségeik. Nyilván evvel állott kapcsolatban, hogy bizonyos idő múlva azt a kérdést intézték hozzánk, hogy nem tapasztaltuk-e a higanygőznek káros hatását a fényelemekre. Miután nekünk ilyen megfigyeléseink nem voltak, a kérdésre nemlegesen válaszoltunk és ilyen irányú kísérleteket nem is végeztünk. Ugyancsak itt kell fel-említenem, hogy a szelénfényelemre vonatkozó, *Kőrösy Ferenc* barátommal közösen végzett vizsgálatainkhoz<sup>3,4</sup> egy a többször említett törlési eljárással készült „Tungsram” fényelemet használtunk és ez a fényelem szénkéneses jód-oldattal szűrt fényben vagyis az infravörösben tetemes érzékenységet mutatott. Nyilvánvaló, hogy ez a fényelem valahogyan higanygőzzel került érintkezésbe; ezt bizonyítja *Kőrösy* barátomnak az a mostanában tett közlése, hogy midőn e méréseket később meg akarta ismételni, a keze ügyébe eső fényelemek közül egyik sem mutatott számottevő infravörös érzékenységet. Végül meg kell említenem, hogy *P. Görlich* „Die lichtelektrischen Zellen” (Leipzig, 1951) c. könyvének 271. oldalán táblázatot közöl a fotocellákról és fényele-

\* Meg kell említenünk, hogy a forgalomba hozott szelénfényelemek a fedőelektroda védelme céljából rendszerint átlátszó lakkal be vannak vonva. Ezen a higanygőz aligha tud átdiffundálni, úgy, hogy az utólagos érzékenyítés céljából a lakkréteget előbb alkalmas oldószerrel, pl. acetonnal el kell távolítani.



mekről s ezek között HgSe-fényelemről is tesz említést, amelynek spektrális érzékenységi maximumát  $1100\text{ m}\mu$ -ban adja meg. Ez az adat, amely csak nemrégiben került kezembe kísérleteinkkel jó összhangban áll; e közlemény eredeti forrásához még nem sikerült hozzájutnunk.

Befejezésül köszönetet mondok mindazoknak, akik a vizsgálat végrehajtásában segítségemre voltak. Elsősorban munkatársaimnak, *Tóth-Pál Sándorné* és *Bodó Zalánné* egyetemi tanársegédeknek, buzgalmukért, amellyel e kísérleteket és méréseket végrehajtották, a Magyar Tudományos Akadémiának a munkatársaimnak nyújtott tudományos ösztöndíjért, az Egyetemi Orvosi Fizikai Intézetnek, a Központi Fizikai Kutató Intézetnek, a Vákuumtechnikai Laboratóriumnak, az Optikai Kutató Laboratóriumnak a részünkre átengedett különböző segédeszközökért, különösen pedig a Konverta Egyenirányítógyár Vezetőségének és munkatársainak, a részünkre átengedett, illetve különleges kívánságaink szerint gyártott szelénegyenirányítókért és fényelemekért.

### Összefoglalás

Szerző egy előző közleményében (M. Tud. Akadémia III. oszt. Közl. 2 (1952), 51, és u. a. kivonatosan Proc. Phys. Soc. B, 65 (1952), 552.) kimutatta, hogy ha szelénfényelemet Hg-gőz hatásának teszünk ki, a primér fotóáram gyakorlatilag változatlan marad, azonban a belső ellenállás és vele együtt az e. m. e. fokozatosan lecsökken. Pontosabb vizsgálatok szerint ugyanekkor a fényelem színérzékenységi görbéje messze az infravörösbe eltolódik s új maximum jelentkezik kb.  $1000\text{ m}\mu$ -nál, amely irodalmi adatok szerint (P. Görlich, Die lichtelektrischen Zellen, Leipzig, 1951, 271. oldal) a keletkezett HgSe-rétegnek tulajdonítható. Az infravörös érzékenység (izzólámpa fénnel és szénkéneg jódos oldatával, mint infravörös szűrővel mérve) az összérzékenységnek 10—18 százaléka.

### IRODALOM

- <sup>1</sup> Selényi Pál, M. Tud. Akadémia III. oszt. Közl. 2 (1952), 51.
- <sup>2</sup> Selényi, P., Proc. Phys. Soc. B, 65, (1952), 552. és 65, (1952) 742.
- <sup>3</sup> F. Körösy u. P. Selényi, Phys. ZS. 32 (1931), 847.
- <sup>4</sup> F. Körösy u. P. Selényi, Ann. Phys. (5) 13 (1932), 703.





# AZ ELEKTROMÁGNESES TÉR MOZGÓ ANIZOTRÓP KÖZEGEKBEN\*

MARX GYÖRGY

Eötvös Loránd Tudományegyetem Fizikai Intézete, Budapest

Az anizotróp közegek polárizhatóságát kifejező egyenleteket relativisztikus alakban írjuk fel. Így azok állandó sebességgel mozgó dielektrikumok esetén is alkalmazhatók. Megadjuk ennek alapján az elektromágneses tér Lagrange-függvényét, melyből a téregyenletek, a kanonikus mennyiségek és az energia-impulzustenzor származtathatók.

## 1. §. A téregyenletek mozgó dielektrikumban

A speciális relativitáselmélet felállításához az egymáshoz képest mozgó vonatkoztatási rendszerekben *vákuumban* lefolyó elektromágneses jelenségek tanulmányozása vezetett el. A mozgó *dielektromos közegekben* végbemenő elektrodinamikai folyamatok törvényszerűségeinek vizsgálata később indult meg és ma sem fejeződött be teljesen. Ennek oka elsősorban abban keresendő, hogy az utóbbi problémakör elvi fontossága kisebb: a vákuumban érvényes törvényszerűségek a dielektrikumok jelenségeit meghatározzák. Ezt nyugvó dielektrikum esetére *Lorentz* elektronelméletében megmutatta. Elvben annak sincs semmi akadályja, hogy a vákuumban felírt és minden inerciarendszerben érvényesnek bizonyult Maxwell-egyenletekből — a dielektrikum molekuláris szerkezetét figyelembe véve — meghatározzák az elektrodinamika mozgó közegekben érvényes törvényeit. Ez az eljárás azonban rendkívül hosszadalmas számolással járna. A nehézkes számítások elvégzésére azonban nincsen szükség. A relativitáselmélet módszereinek, a tenzorkalkulusnak a felhasználásával a nyugvó dielektrikumok fenomenológiai elméletéből kiindulva eljuthatunk a teljesen általános, mozgó dielektromos közegekben is érvényes törvényekhez.

*Nyugvó dielektrikumban* az elektromágneses tér változásait a Maxwell-féle *téregyenletek* írják le:

$$\operatorname{rot} \mathfrak{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathfrak{D}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathfrak{j}, \quad \operatorname{div} \mathfrak{D} = 4\pi \varrho,$$

$$\operatorname{rot} \mathfrak{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathfrak{B}}{\partial t} = 0, \quad \operatorname{div} \mathfrak{B} = 0.$$

( $\mathfrak{E}$  az elektromos,  $\mathfrak{H}$  a mágneses térerősség,  $\mathfrak{D}$  az elektromos megosztás,  $\mathfrak{B}$

\* Bemutatta Novobátsky Károly az 1953 március 11-én tartott felolvasó ülésen. Először megjelent német nyelven az Acta Physica Hungarica 3, (1953), 75.



a mágneses indukció vektora;  $\rho$  az elektromos töltés,  $j$  az áram sűrűsége.) Tudjuk azonban, hogy a téregyenletek a térre jellemző  $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{D}$ ,  $\mathcal{H}$ ,  $\mathcal{B}$  vektorokat nem határozzák meg teljesen. Meg kell adnunk azokat az összefüggéseket is, melyek a szigetelő közeg fizikai sajátosságait (polárizálhatóságát) fejezik ki, kapcsolatot teremtve  $\mathcal{E}$  és  $\mathcal{D}$ , valamint  $\mathcal{H}$  és  $\mathcal{B}$  között. Ezek az ú. n. *anyagí egyenletek* a legegyszerűbb esetben homogén lineáris összefüggések:

$$\mathcal{D} = \varepsilon \mathcal{E}, \quad \mathcal{B} = \mu \mathcal{H}.$$

Ha  $\varepsilon$  és  $\mu$  skalár, *izotróp* közegről, ha (háromdimenziós) tenzor, *anizotróp* közegről beszélünk. (Ha az anyagi egyenlet által kifejezett összefüggés nem homogén, permanens polarizációról van szó. Ennek relativisztikus tárgyalására vonatkozólag 1. [8].) Anizotróp dielektrikumban a tér által keltett polarizáció nem esik a térerősség irányában, ezért  $\mathcal{D}$  a  $\mathcal{E}$ -vel,  $\mathcal{H}$  a  $\mathcal{B}$ -vel nem párhuzamos. Ez a jelenség legtöbbször kristályos dielektrikumban észlelhető.

Azt a kérdést, hogy a dielektrikumhoz képest mozgó megfigyelő is érvényesnek találja-e a felírt téregyenleteket, Minkowski vizsgálta meg. Az  $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{H}$ ,  $\mathcal{D}$ ,  $\mathcal{B}$  vektorok komponenseit két antiszimmetrikus tenzor hat-hat független komponenséhez rendelte, a következőképpen:

$$F_{ik} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{B}_z & -\mathcal{B}_y & -i\mathcal{E}_x \\ -\mathcal{B}_z & 0 & \mathcal{B}_x & -i\mathcal{E}_y \\ \mathcal{B}_y & -\mathcal{B}_x & 0 & -i\mathcal{E}_z \\ i\mathcal{E}_x & i\mathcal{E}_y & i\mathcal{E}_z & 0 \end{pmatrix}, \quad G_{ik} = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{H}_z & -\mathcal{H}_y & -i\mathcal{D}_x \\ -\mathcal{H}_z & 0 & \mathcal{H}_x & -i\mathcal{D}_y \\ \mathcal{H}_y & -\mathcal{H}_x & 0 & -i\mathcal{D}_z \\ i\mathcal{D}_x & i\mathcal{D}_y & i\mathcal{D}_z & 0 \end{pmatrix}.$$

Ha még a koordináták jelölésére bevezetjük a négydimenziós

$$x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z, \quad x_4 = ict$$

jelölést, a dielektrikumok Maxwell-egyenletei egyszerű helyettesítéssel a következő alakra hozhatók:

$$\partial_k G_{ik} - 4\pi s_i = 0, \quad (1)$$

$$\partial_i F_{kl} + \partial_k F_{li} + \partial_l F_{ik} = 0. \quad (2)$$

( $\partial_k = \partial/\partial x_k$ ,  $s_i$  pedig az  $\frac{1}{c}j_x$ ,  $\frac{1}{c}j_y$ ,  $\frac{1}{c}j_z$ ,  $i\rho$  komponensekből megalkotott négyesvektor.) Az így nyert egyenletek alakjából látható, hogy négyesvektor, ill. tenzor zérus voltát fejezik ki, ezért nem csak egy vonatkoztatási rendszerben, hanem minden inerciarendszerben érvényesek. Használhatók például a mozgó, áramló közegben kialakuló elektromágneses tér leírására is.

A (2) egyenlet értelmében az  $F_{ik}$  tenzor egy négyesvektor (a  $\varphi_i$  négyespotenciál) rotációjaként állítható elő:

$$F_{ik} = \partial_i \varphi_k - \partial_k \varphi_i.$$

A további tárgyalás szempontjából célszerű lesz bizonyos új mennyiségek bevezetése, melyeket az  $F_{ik}$  és  $G_{ik}$  tenzor komponenseiből képezünk. Jelölje  $\partial_{ikrs}^*$  a következő Levi—Civita által bevezetett (pseudo-) tenzort:

$$\delta_{ikrs}^* = \begin{cases} 0, & \text{ha az } (ikrs) \text{ indexek nem mind különböznek egymástól.} \\ +1, & \text{ha } (ikrs) \text{ az } (1234) \text{ páros permutációja.} \\ -1, & \text{ha } (ikrs) \text{ az } (1234) \text{ páratlan permutációja.} \end{cases}$$

Ezek segítségével definiáljuk a következő két (pszeudo-) tenzort:

$$F_{ik}^* = -\frac{i}{2} \delta_{ikrs}^* F_{rs}, \quad G_{ik}^* = -\frac{i}{2} \delta_{ikrs}^* G_{rs}. \quad (4)$$

Tekintettel  $\delta_{ikrs}^*$  definíciójára,  $F_{ik}^*$  és  $G_{ik}^*$  komponensei a következők:

$$F_{ik}^* = \begin{pmatrix} 0 & -\mathfrak{E}_z & \mathfrak{E}_y & -i\mathfrak{B}_x \\ \mathfrak{E}_z & 0 & -\mathfrak{E}_x & -i\mathfrak{B}_y \\ -\mathfrak{E}_y & \mathfrak{E}_x & 0 & -i\mathfrak{B}_z \\ i\mathfrak{B}_x & i\mathfrak{B}_y & i\mathfrak{B}_z & 0 \end{pmatrix}, \quad G_{ik}^* = \begin{pmatrix} 0 & -\mathfrak{D}_z & \mathfrak{D}_y & -i\mathfrak{S}_x \\ \mathfrak{D}_z & 0 & -\mathfrak{D}_x & -i\mathfrak{S}_y \\ -\mathfrak{D}_y & \mathfrak{D}_x & 0 & -i\mathfrak{S}_z \\ i\mathfrak{S}_x & i\mathfrak{S}_y & i\mathfrak{S}_z & 0 \end{pmatrix}.$$

Jelölje  $u_k$  a dielektrikus közeg (állandó) négyessebességét  $c$  vákuumfénysebesség-egységekben:

$$u_k = \frac{1}{c} \frac{dx_k}{dt}.$$

Ismeretes, hogy a négyessebesség kielégíti a következő összefüggést:

$$u_k u_k = -1. \quad (5)$$

A közeg négyessebességének segítségével képezzük a következő négyesvektorokat (ill. pszeudovektorokat):

$$E_i = F_{ik} u_k, \quad D_i = G_{ik} u_k, \quad B_i = F_{ik}^* u_k, \quad H_i = G_{ik}^* u_k. \quad (6)$$

A használt jelölést az indokolja, hogy a megfigyelőhöz képest nyugvó dielektrikum esetén ( $u_1, u_2, u_3 = 0, u_4 = i$ ) az egyes vektorok komponensei a következők:

$$\begin{aligned} E_i &= (\mathfrak{E}_x, \mathfrak{E}_y, \mathfrak{E}_z, 0), & D_i &= (\mathfrak{D}_x, \mathfrak{D}_y, \mathfrak{D}_z, 0), \\ B_i &= (\mathfrak{B}_x, \mathfrak{B}_y, \mathfrak{B}_z, 0), & H_i &= (\mathfrak{S}_x, \mathfrak{S}_y, \mathfrak{S}_z, 0). \end{aligned} \quad (7)$$

Mivel az  $F_{ik}, G_{ik}, F_{ik}^*, G_{ik}^*$  tenzorok antiszimmetrikusak, a definícióból következik, hogy mind a négy bevezetett négyesvektor merőleges a négyessebességre:

$$E_i u_i = 0, \quad D_i u_i = 0, \quad B_i u_i = 0, \quad H_i u_i = 0. \quad (8)$$

Az  $E_i, D_i, H_i, B_i$  vektorok ugyanúgy felhasználhatók az elektromágneses tér jellemzésére, mint az  $F_{ik}$  és  $G_{ik}$  tenzorok. Ez abból is nyilvánvaló, hogy az  $F_{ik}$ -ból alkotott  $E_i$  és  $B_i$ , illetve a  $G_{ik}$ -ból alkotott  $H_i$  és  $D_i$  segítségével maguk a tenzorkomponensek is kifejezhetők:

$$\begin{aligned} F_{ik} &= u_i E_k - u_k E_i + i \delta_{ikrs}^* u_r B_s, \\ G_{ik} &= u_i D_k - u_k D_i + i \delta_{ikrs}^* u_r H_s. \end{aligned} \quad (9)$$

(Ezen tenzoregyenletek fennállása legegyszerűbben a dielektrikumhoz rögzített koordináta-rendszerben verifikálható. A tenzor-alak biztosítja az összefüggés érvényességét minden inerciarendszerben.)



Az (1)—(2) Maxwell-egyenletek következményeként az alábbi összefüggések állíthatók fel az  $E_i, D_i, H_i, B_i$  vektorok komponensei között:

$$\begin{aligned}\partial_i H_k - \partial_k H_i + u_r \partial_r G_{ik}^* &= 4\pi \delta_{ikrs}^* u_r j_s, & \partial_k D_k &= 4\pi \rho_0, \\ \partial_i E_k - \partial_k E_i + u_r \partial_r F_{ik} &= 0, & \partial_k B_k &= 0.\end{aligned}$$

Itt

$$\rho_0 = -u_k S_k$$

a nyugalmi töltéssűrűség,

$$j_i = s_i - \rho_0 u_i = \sigma_{ik} E_k$$

a konduktív áram sűrűsége ( $\sigma_{ik}$  a vezetőképesség). A most kapott téregyenletek szoros formai rokonságot mutatnak a Maxwell-egyenletek nem-relativisztikus alakjával. A konduktív és konvektív áram hatása kovariánsan szétválasztva jelentkezik bennük.

A meghatározandó térerősség-komponensek száma tizenkettő:  $F_{ik}$  és  $G_{ik}$  tizenkét egymástól független komponense. A Maxwell-féle egyenletrendszer nyolc egyenlete ezek kiszámítására nem elegendő. Ismernünk kell a közeg polározhatóságát kifejező anyagi egyenletek relativisztikus, tehát mozgó közegben is érvényes alakját. Ha a tér által létesített polarizáció a térerősség-komponensek homogén lineáris függvénye, az anyagi egyenletek általános alakja a következő:

$$G_{ik} = \gamma_{ikrs} F_{rs}.$$

Vákuumban egyszerűen

$$G_{ik} = F_{ik}.$$

Az izotróp (nem kristályos) dielektrikumok esetén használható anyagi egyenleteket relativisztikus alakban először *Minkowski* írta fel. Az anyagi egyenletek összefoglaló,  $G_{ik}$ -ra megoldott alakja *Novobátzky* szerint [2]:

$$G_{ik} = \frac{1}{\mu} (F_{ik} - u_i E_k + u_k E_i) + \varepsilon (u_i E_k - u_k E_i).$$

Az utóbbi években sokat foglalkoztak a kutatók a mozgó dielektromos közegek vizsgálatával, elsősorban a tér által kifejtett erőhatásokkal kapcsolatban [1—6]. Ezek a vizsgálatok azonban kizárólag izotróp anyagokra szorítkoztak. A következőkben célul tűzzük ki az elektromágneses tér olyan törvényeinek meghatározását, melyek tetszőleges inerciarendszerben, anizotróp közegek jelenléte esetén is használhatók. Mivel a Maxwell-féle téregyenletek a közegtől függetlenül érvényesek, a főfeladat az anizotróp közeg sajátosságait leíró anyagi egyenletek relativisztikus alakban való felállítása.

## 2. §. Az anyagi egyenletek anizotróp közegben

Nyugvó anizotróp közegben ismeretes az anyagi egyenletek alakja:

$$\mathfrak{D}_x = \varepsilon_{xx} \mathfrak{E}_x + \varepsilon_{xy} \mathfrak{E}_y + \varepsilon_{xz} \mathfrak{E}_z, \quad \text{hasonló } \mathfrak{D}_y \text{ és } \mathfrak{D}_z \text{ kifejezése.} \quad (11)$$

$$\mathfrak{B}_x = \mu_{xx} \mathfrak{H}_x + \mu_{xy} \mathfrak{H}_y + \mu_{xz} \mathfrak{H}_z, \quad \text{hasonló } \mathfrak{B}_y \text{ és } \mathfrak{B}_z \text{ kifejezése.} \quad (12)$$

Mivel a  $|\mu|$  determináns nem zérus, (12)-ből képezhetők az alábbi egyenletek:

$$\mathfrak{H}_x = \varkappa_{xx} \mathfrak{B}_x + \varkappa_{xy} \mathfrak{B}_y + \varkappa_{xz} \mathfrak{B}_z, \text{ hasonló } \mathfrak{H}_y \text{ és } \mathfrak{H}_z \text{ kifejezése.} \quad (13)$$

A mozgó dielektrikumok esetén érvényes egyenletek ( $\varepsilon$  és  $\varkappa$  transzformációs jellegének ismeretében) a nyugvó közegek felírt egyenleteiből Lorentz-transzformációval meghatározhatók volnának. A következőkben a hosszadalmas transzformáció helyett egyszerűbb eljárást választunk.

Vezessük be az elektromos polározhatóság jellemzésére az  $\varepsilon_{ik}$ , a mágneses polározhatóság jellemzésére a  $\varkappa_{ik}$  tenzort a következőképpen. A dielektrikumhoz rögzített koordinátarendszerben  $\varepsilon_{ik}$  és  $\varkappa_{ik}$  komponensei legyenek a következők:

$$\varepsilon_{ik} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} & 0 \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} & 0 \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varkappa_{ik} = \begin{pmatrix} \varkappa_{xx} & \varkappa_{xy} & \varkappa_{xz} & 0 \\ \varkappa_{yx} & \varkappa_{yy} & \varkappa_{yz} & 0 \\ \varkappa_{zx} & \varkappa_{zy} & \varkappa_{zz} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Olyan koordinátarendszerben, melyben a dielektrikum (állandó sebességgel) mozog,  $\varepsilon_{ik}$  és  $\varkappa_{ik}$  komponenseit a fenti komponensekből tenzor-transzformációval határozzuk meg.

A dielektrikumhoz rögzített koordinátarendszerben, ennek következtében minden más inerciarendszerben is fennállanak a következő vektoregyenletek:

$$\varepsilon_{ik} u_i = 0, \quad \varepsilon_{ik} u_k = 0, \quad (14)$$

$$\varkappa_{ik} u_i = 0, \quad \varkappa_{ik} u_k = 0. \quad (15)$$

A nyugvó közeg esetén érvényes (11) összefüggést fejezzük ki a bevezetett relativisztikus  $D_i$ ,  $\varepsilon_{ik}$  és  $E_k$  mennyiségek segítségével. A vektor- és tenzorkomponensekre való átírás az anyagi egyenlet következő alakjára vezet:

$$D_i = \varepsilon_{ik} E_k. \quad (16)$$

A szintén nyugvó közegben érvényes (13) anyagi egyenlet  $H_i$ ,  $\varkappa_{ik}$  és  $B_k$  komponensekkel felírt alakja:

$$H_i = \varkappa_{ik} B_k. \quad (17)$$

A most kapott összefüggések vektorok és tenzorok között állnak fenn, tehát nem csak egy speciális koordinátarendszerben (a dielektrikumhoz rögzített vonatkoztatási rendszerben) érvényesek, hanem minden más inerciarendszerben is. Ez viszont azt jelenti, hogy a (16) és (17) egyenletek formájában megtaláltuk a közeg polározhatóságát kifejező anyagi egyenletek relativisztikus, mozgó anizotróp dielektrikum esetén is érvényes alakját.

Könnyű belátni, hogy a (16) és (17) alatt felírt egyenletcsoport csak három-három független egyenletet tartalmaz. A kétszer négy egyenletkomponens ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) közt mindig fennáll a következő azonosság:

$$(D_i - \varepsilon_{ik} E_k) u_i = 0, \quad (H_i - \varkappa_{ik} B_k) u_i = 0.$$

A hat független egyenletkomponens éppen elegendő  $F_{ik}$  ismeretében a hat  $G_{ik}$ -komponens meghatározására.



A (16)–(17) egyenletek a meghatározandó  $G_{ik}$ -komponenseket impliciten tartalmazzák. Már pedig több szempontból kívánatos volna anizotróp közegekben is az anyagi egyenleteknek (10)-hez hasonló explicit alakban való ismerete. Az explicit összefüggés felírására a (9) egyenlet módot nyújt. Ebbe behelyettesítve  $D_i$  és  $H_i$  (16), illetve (17) alatt kifejezett alakját kapjuk, hogy

$$G_{ik} = (u_i \varepsilon_{kr} - u_k \varepsilon_{ir}) E_r + i \delta_{ikrs}^* u_r z_{st} B_t, \quad (18)$$

vagy tekintettel  $E_r$  és  $B_t$  definíciójára

$$G_{ik} = (u_i \varepsilon_{ku} u_v - u_k \varepsilon_{iv} u_v + \frac{1}{2} \delta_{ikrs}^* u_r z_{sm} u_n \delta_{mnur}^*) F_{uv}, \quad (19)$$

ami éppen a keresett alakú összefüggés.

Az anyagi egyenlet (18) alakjának felhasználásával írjuk még fel a  $G_{ik}^*$  tenzor  $F_{ik}$ -komponensekkel ( $E_r$ -vel és  $B_t$ -vel) kifejezett alakját.

$$G_{ik}^* = \frac{i}{2} \delta_{ikab}^* G_{ab} = -\frac{i}{2} \delta_{ikab}^* (u_a \varepsilon_{br} - u_b \varepsilon_{ar}) E_r + \frac{1}{2} \delta_{ikab}^* \delta_{abrs}^* u_r z_{st} B_t. \quad (20)$$

Vegyük figyelembe a következő azonosságot:

$$\frac{1}{2} \delta_{ikab}^* \delta_{abrs}^* = \delta_{ir} \delta_{ks} - \delta_{is} \delta_{kr}.$$

Felhasználva még azt, hogy  $\delta_{ikab}^*$  bármely két indexében antiszimmetrikus,  $G_{ik}^*$  kifejezését a következő alakban hozhatjuk:

$$G_{ik}^* = (u z_{ikr} - u_k z_{ir}) B_r - (i \delta_{ikrs}^* u_r \varepsilon_{st}) E_t. \quad (21)$$

A most kapott egyenlet (18)-nak teljesen ekvivalens megfelelője.

Az anyagi egyenlet (19) alatt felírt explicit alakjához a (16) és (17) egyenletekből kiindulva jutottunk el. Kimutatjuk, hogy fordítva is eljáráhatunk: a (16) és (17) egyenletek levezethetők a (19) egyenletből. Ugyanis

$$\begin{aligned} D_i &= G_{ik} u_k = (u_i u_k \varepsilon_{kr} - u_k u_k \varepsilon_{ir}) E_r + (i \delta_{ikrs}^* u_k u_r z_{st}) B_t, \\ H_i &= G_{ik}^* u_k = (u_i u_k z_{kr} - u_k u_k z_{ir}) B_r - (i \delta_{ikrs}^* u_k u_r \varepsilon_{st}) E_t. \end{aligned}$$

(14) és (15) következtében a jobboldalak első tagja zérus.

$$\delta_{ikrs}^* = -\delta_{irks}^*$$

folytán a jobboldalak harmadik tagja is zérust ad. Az (5) összefüggést is figyelembe véve végül kapjuk:

$$D_i = \varepsilon_{ir} E_r, \quad H_i = z_{ir} B_r.$$

Ezek voltak a leszámaztatandó egyenletek.

A mondottakból következik, hogy az anyagi egyenletek (16)–(17), (19), (18), ill. (21) alatt felírt alakjai egymással teljesen ekvivalensek. Közülük számításainkban mindig a célnak legmegfelelőbbet használhatjuk.

Könnyen kimutatható, hogy az anizotróp közegek most felállított relativisztikus anyagi egyenletei az izotróp közegek esetén érvényes, *Novobátzky*

által felírt (10) egyenletet speciális esetként magukban foglalják. Csak azt kell figyelembe venni, hogy izotróp közegben a dielektrikum elektromos és mágneses polározhatósága egy-egy skaláris mennyiséggel kifejezhető;

$$\varepsilon_{ik} = \varepsilon(\delta_{ik} + u_i u_k), \quad \chi_{ik} = \frac{1}{\mu}(\delta_{ik} + u_i u_k).$$

A gyakorlatban legtöbbször olyan dielektrikumokkal találkozunk, melyek az elektromos polározhatóság szempontjából többé-kevésbé anizotrópok, mágneses polározhatóságuk azonban általában jelentéktelen (a mágneses permeabilitás jó közelítésben  $\mu = 1$ ). Ebben az esetben az anyagi egyenletek a következő egyszerű alakban írhatók fel:

$$G_{ik} = F_{ik} - u_i E_k + u_k E_i + (u_i \varepsilon_{kr} - u_k \varepsilon_{ir}) E_r. \quad (22)$$

### 3. §. Példa mozgó anizotróp dielektrikum polarizációjára

A mozgó anizotróp dielektrikum polározhatóságát kifejező egyenlet alkalmazását egy egyszerű példán mutatjuk be. Tekintsünk egy téglalakúra formált homogén kristályos dielektrikumot. A téglatest élei azonban ne essenek egybe a kristályosodás főtengelyeivel. Ha az  $x, y, z$  koordinátarendszert úgy vesszük fel, hogy a koordinátatengelyek a téglatest éleivel párhuzamosak legyenek, akkor az  $A$  kristálytengely az  $x$ -tengellyel, a  $B$  kristálytengely az  $y$ -tengellyel zárjon be  $\varphi$  szöget. A  $C$  kristálytengely legyen párhuzamos a  $z$ -tengellyel.

A kristályos anyag polározhatóságát az egymásra merőleges  $A, B, C$  kristálytengelyek irányában az  $\alpha_A, \alpha_B, \alpha_C$  szuszceptibilitások, illetve az

$$\varepsilon_A = 1 + 4\pi\alpha_A, \quad \varepsilon_B = 1 + 4\pi\alpha_B, \quad \varepsilon_C = 1 + 4\pi\alpha_C \quad (23)$$

dielektromos állandók fejezik ki (a kristályhoz rögzített vonatkoztatási rendszerben). Ekkor az  $\varepsilon_{ik}$  tenzor komponensei a kristályhoz rögzített vonatkoztatási rendszerben a következők:

$$\varepsilon_{ik} = \begin{pmatrix} \varepsilon_A \cos^2 \varphi + \varepsilon_B \sin^2 \varphi & (\varepsilon_A - \varepsilon_B) \cos \varphi \sin \varphi & 0 & 0 \\ (\varepsilon_A - \varepsilon_B) \cos \varphi \sin \varphi & \varepsilon_A \sin^2 \varphi + \varepsilon_B \cos^2 \varphi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Egyszerűség kedvéért tételezzük fel, hogy a kristály mágneses szuszceptibilitása zérus,  $\mu = 1$ .

Mozogjon a kristály az  $x$ -tengely irányában állandó  $v = c\beta$  sebességgel  $z$ -irányú homogén mágneses téren keresztül. Elektromos tér ne legyen jelen. Ekkor az  $F_{ik}$ -tenzornak egyedül zérustól különböző komponensei a következők:

$$F_{12} = -F_{21} = \mathfrak{B}_2 = B.$$



A kristályos test mozgását leíró négyessebesség komponensei pedig:

$$u_1 = \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad u_2 = 0, \quad u_3 = 0, \quad u_4 = \frac{i}{\sqrt{1-\beta^2}}.$$

Ebben a koordináta-rendszerben, melyben a kristály állandó sebességű tranzlációt végez, az  $\varepsilon_{ik}$  tenzor komponensei a nyugalmi koordináta-rendszerben ismert komponensekből Lorentz-transzformációval meghatározhatók:

$$\varepsilon_{ik} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & 0 & i\beta\varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & 0 & i\beta\varepsilon_{12} \\ 0 & 0 & \varepsilon_C & 0 \\ i\beta\varepsilon_{11} & i\beta\varepsilon_{12} & 0 & -\beta^2\varepsilon_{11} \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \varepsilon_{11} &= \frac{1}{1-\beta^2}(\varepsilon_A \cos^2 \varphi + \varepsilon_B \sin^2 \varphi), \\ \varepsilon_{12} &= \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}(\varepsilon_A - \varepsilon_B) \sin \varphi \cos \varphi, \\ \varepsilon_{22} &= \varepsilon_A \sin^2 \varphi + \varepsilon_B \cos^2 \varphi. \end{aligned}$$

$F_{ik}$ ,  $\varepsilon_{ik}$  és  $u_k$  ismeretében a (22) anyagi egyenlet alapján számítsuk ki a  $G_{ik}$  tenzor, azaz a mágneses térerősség és elektromos megosztási vektor komponenseinek értékét a mozgó kristályos anyag belsejében.

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}_x &= G_{23} = 0, & \mathfrak{G}_y &= G_{31} = 0, & \mathfrak{G}_z &= G_{31} = \frac{1-\varepsilon_{22}\beta^2}{1-\beta^2}B, \\ \mathfrak{D}_x &= iG_{14} = -\varepsilon_{12}\beta B, & \mathfrak{D}_y &= iG_{24} = \frac{1-\varepsilon_{22}}{\sqrt{1-\beta^2}}\beta B, & \mathfrak{D}_z &= iG_{34} = 0. \end{aligned}$$

A gyakorlatilag megvalósítható sebességeknél eltekinthetünk a  $\beta^2 = v^2/c^2$  nagyságrendű tagoktól. Figyelembe véve az  $\varepsilon_{ik}$  tenzorkomponensek konkrét alakját kapjuk:

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{B},$$

$$\mathfrak{D}_x = -(\varepsilon_A - \varepsilon_B) \cos \varphi \sin \varphi \beta B, \quad \mathfrak{D}_y = -(\varepsilon_A \sin^2 \varphi + \varepsilon_B \cos^2 \varphi - 1) \beta B, \quad \mathfrak{D}_z = 0.$$

Látható, hogy a mozgó kristályos közeg (a használt feltételek mellett) a mágneses teret nem befolyásolja,  $B$ -t tehát a kristályon kívül létrehozott mágneses térerősséggel azonosíthatjuk. A kristály belsejében azonban az elektromos megosztás  $\mathfrak{D}$  vektora zérustól különbözik. Mivel

$$\mathfrak{D} = \mathfrak{E} + 4\pi\mathfrak{P},$$

és az  $\mathfrak{E}$  elektromos térerőssége zérus,  $\mathfrak{D}$  teljes mértékben a  $\mathfrak{P}$  elektromos polarizációból adódik, melyet a mágneses térben való mozgás létesít. (23) nyomán a dielektromos állandó helyett az elektromos szuszceptibilitást bevezetve a polarizáció komponensei a következőknek adódnak:

$$\mathfrak{P}_x = -(\alpha_A - \alpha_B) \cos \varphi \sin \varphi \beta B, \quad \mathfrak{P}_y = -(\alpha_A \sin^2 \varphi + \alpha_B \cos^2 \varphi) \beta B, \quad \mathfrak{P}_z = 0.$$

Az elektromos tér nélkül létesített polarizáció abszolút értéke

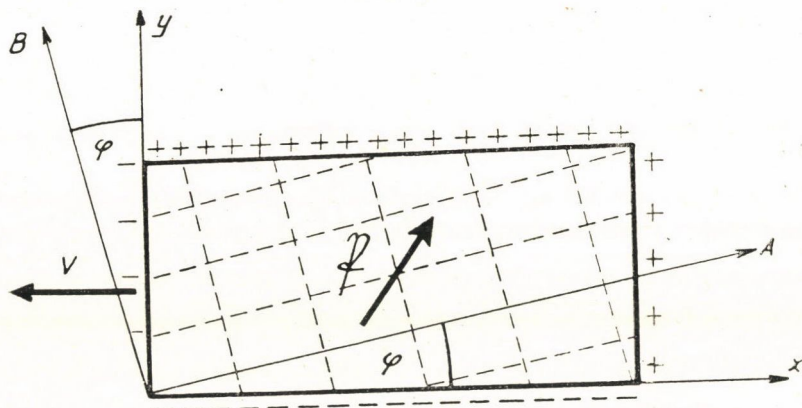
$$|\mathfrak{P}| = \sqrt{\mathfrak{P}_x^2 + \mathfrak{P}_y^2 + \mathfrak{P}_z^2} = \beta B \sqrt{\alpha_A^2 \sin^2 \varphi + \alpha_B^2 \cos^2 \varphi}. \quad (24)$$

A polarizációvektor iránya nem egyezik meg a molekulárisan kötött töltésekre ható, a mozgássebességre és a mágneses térerősségre merőlegesen  $y$  irányba

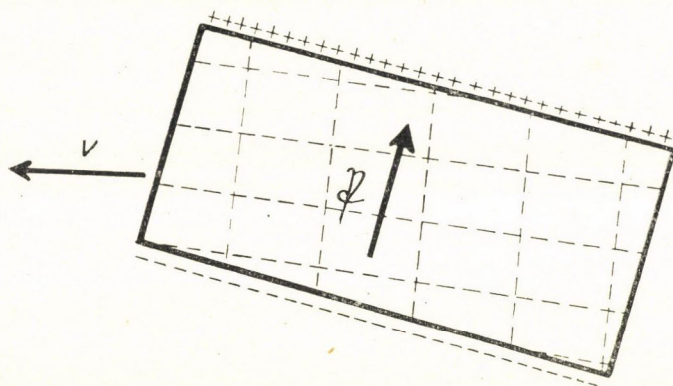
mutató Lorentz-erő irányával, hanem attól

$$\psi = \arctg \frac{\mathfrak{P}_x}{\mathfrak{P}_y} = \arctg \frac{(\alpha_A - \alpha_B) \sin \varphi \cos \varphi}{\alpha_A \sin^2 \varphi + \alpha_B \cos^2 \varphi}$$

szöggel eltér. (1. ábra.) A relativisztikus anyagi egyenlethől nyert eredményt igazolja, hogy hasonló eredményre jutunk, ha a mágneses tér által keltett polarizáció nagyságát és irányát a kristállyal együttmozgó koordinátarendszerben határozzuk meg a *nyugvó* közegek *ismert* anyagi egyenleteinek felhasználásával.



1. ábra. Mozgó kristálytest elektromos polarizációja mágneses térben (általános helyzet)



2. ábra. Mozgó kristálytest elektromos polarizációja mágneses térben (a polarizáció merőleges a kristálylapra)

A számítás eredménye azt mutatja, hogy a mágneses téren való keresztülhaladás következtében a kristály  $x$ -normálisú lapján  $\mathfrak{P}_x$  sűrűségű, az  $y$ -normálisú lapon  $\mathfrak{P}_y$  sűrűségű szabad felületi töltések jelennek meg, a szemközti lapokon ellentétesen egyenlő előjellel. A töltések nagysága a kristálytengelyek és a téglatest élei által bezárt szögtől függ. (Izotróp dielektri-



kumnak mágneses térben való mozgatása esetén hasonló elrendezés mellett az  $x$ -normálisú lap mindig töltetlen marad.)

Ha a kristályos testet a mágneses tér irányát megadó  $z$ -tengely körül elforgatjuk, egyszer előáll az a helyzet, hogy csak két szemben fekvő lap mutat ellentétesen egyenlő felületi töltést. Ez akkor következik be, mikor a polarizációvektor éppen e lapokra merőleges. (2. ábra.) A leírt jelenséget létesítő testhelyzet független a kristály tranzlációs sebességétől.

A tárgyalt jelenségek kísérleti kimutatása nem látszik technikailag keresztülvihetetlennek, noha a kísérleti viszonyok bonyolultabbak, mint az izotróp dielektrikumra vonatkozó analóg, *Wilson* által elvégzett kísérletnél.

#### 4. §. A Lagrange-függvény

Az anyagi egyenletek explicit alakjának ismeretében könnyen belátható, hogy az (1), (3) és (19) egyenletek adott  $s_i, u_i, \varepsilon_{ik}, \chi_{ik}$  esetén alkalmasak az elektromágneses tér meghatározására. Helyettesítsük be a (3) egyenletet a (19)-be, majd azt (1)-be. Kapjuk:

$$\partial_k [(u_i \varepsilon_{ku} u_v - u_k \varepsilon_{iu} u_v + i \delta_{ikrs}^* u_r \chi_{sm} u_n \delta_{mnv}^*) (\partial_u \varphi_v - \partial_v \varphi_u)] = 4\pi s_i. \quad (25)$$

Az egyenlet fennáll  $i = 1, 2, 3, 4$  esetén. A négy egyenletkomponens a négy  $\varphi_i$  potenciálkomponenst meghatározza, belőlük a térerősségek komponensei a leírt módon képezhetők.

A téregyenletek potenciálokkal kifejezett (25) alakja Lagrange-függvényből származtatható. Ehhez csak azt kell feltételeznünk, hogy a dielektrikumhoz rögzített vonatkoztatási rendszerben

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{yx}, & \varepsilon_{yz} &= \varepsilon_{zy}, & \varepsilon_{zx} &= \varepsilon_{xz}, \\ \chi_{xy} &= \chi_{yx}, & \chi_{yz} &= \chi_{zy}, & \chi_{zx} &= \chi_{xz}. \end{aligned} \quad (26)$$

(Ugyanez a feltétele annak, hogy beszélhessünk a dielektrikum belsejében az elektromágneses tér energiájáról, mint az erőter pillanatnyi állapota által meghatározott, a tér létrehozásának módjától független állapotfüggvényről.)\* (26)-ból, valamint  $\varepsilon_{ik}$  és  $\chi_{ik}$  definíciójából következik, hogy bármely inerciarendszerben

$$\varepsilon_{ik} = \varepsilon_{ki}, \quad \chi_{ik} = \chi_{ki}. \quad (27)$$

Az elektromágneses teret meghatározó (25) egyenlet a következő Lagrange-függvényből származtatható:

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{16\pi} F_{ab} G_{ab} - s_r \varphi_r = \\ &= \frac{1}{8\pi} F_{ab} \left( u_a \varepsilon_{bu} u_v + \frac{1}{2} \delta_{abrs}^* u_r \chi_{sm} u_n \delta_{mnv}^* \right) F_{uv} - s_r \varphi_r. \end{aligned} \quad (28)$$

(Az  $F_{ik}$  tenzort gondoljuk a  $\varphi_i$  potenciállal kifejezve.) Ugyanis a Lagrange-

\* Lásd pl. J. Frenkel, loc. cit. 7, 55. old.

függvény integrálját szélsőértékké tevő Euler—Lagrange-egyenlet:

$$\frac{\partial L}{\partial \varphi_i} - \partial_k \frac{\partial L}{\partial \hat{c}_k \varphi_i} = \partial_k \left( 2 \frac{\partial L}{\partial F_{ik}} \right) - s_i = 0. \quad (29)$$

De

$$2 \frac{\partial L}{\partial F_{ik}} = \frac{1}{8\pi} \left( u_i \varepsilon_{ku} u_v - u_k \varepsilon_{iv} u_v + \frac{1}{2} \delta_{ik,rs}^* u_r z_{sm} u_n \delta_{mnv}^* \right) F_{uv} + \\ + \frac{1}{8\pi} \left( u_a \varepsilon_{bi} u_k - u_b \varepsilon_{ai} u_k + \frac{1}{2} \delta_{abrs}^* u_r z_{sm} u_n \delta_{mnk}^* \right) F_{ab} = \frac{1}{4\pi} G_{ik}.$$

(Figyelembe vettük a (27) összefüggést.) Ezt (29)-be behelyettesítve kapjuk a levezetendő (1), ill. (25) egyenletet.

A Lagrange-függvény ismerete lehetőséget nyújt arra, hogy az anizotróp dielektrikumok elektromágneses terének kvantumelméletét is kidolgozzuk. A  $\varphi_i$  potenciálhoz kanonikusan konjugált függvények

$$\pi_i = c \frac{\partial L}{\partial \varphi_i} = \frac{1}{i} \frac{\partial L}{\partial \partial_4 \varphi_i} = \frac{2}{i} \frac{\partial L}{\partial F_{4i}} = \frac{1}{4\pi i} G_{4i}.$$

Az  $\mathfrak{A}$  vektorpotenciálhoz, kanonikusan konjugált változó tehát a  $\mathfrak{D}$  megosztási vektor  $1/4\pi$ -szerese, ugyanúgy, mint izotróp közegben [2]. (A  $\Phi$  skaláris potenciál kanonikus konjugáltja most is zérus.) A kanonikus változó-párokhoz rendelt operátorok közt fennálló csererelációból kiindulva a kvantumelméleti tárgyalás is elvégezhető.

### 5. §. Az elektromágneses tér energia-impulzus tenzora

Az izotróp dielektrikumok energia-impulzus-tenzorának pontos alakja ma is vitatott kérdés [1–6]. Valószínűnek látszik, hogy vagy az Abraham által bevezetett szimmetrikus

$$T_{ik} = \frac{1}{4\pi\mu} \left[ F_{ir} F_{kr} - \frac{1}{4} \delta_{ik} F_{rs} F_{rs} + (\varepsilon\mu - 1) \left( u_i u_k E_r E_r - E_i E_k + \frac{1}{2} \delta_{ik} E_r E_r \right) \right] = \\ = \frac{1}{4\pi} \left[ F_{ir} G_{kr} - \frac{1}{4} \delta_{ik} F_{rs} G_{rs} \right] + \frac{\varepsilon\mu - 1}{4\pi\mu} (u_i E_r - F_{ir}) u_k E_r$$

tenzor, vagy pedig a Minkowski által felállított aszimmetrikus, de egyszerűbb alakú

$$t_{ik} = \frac{1}{4\pi} \left[ F_{ir} G_{kr} - \frac{1}{4} \delta_{ik} F_{rs} G_{rs} \right]$$

tenzor írja le izotróp dielektrikumban az elektromágneses tér dinamikai sajátosságait. Az Abraham-féle energia-impulzus-tenzor, mint azt Novobátzky megmutatta, a téregyenletekkel együtt Lagrange-függvényből származtatható [2]. Az alábbiakban röviden megvizsgáljuk, hogy anizotróp dielektrikumok esetében, melyek skaláris  $\varepsilon$  dielektromos és  $\mu$  permeabilitási együtthatóval nem írhatók le, az energia-impulzus-tenzorok és a velük kapcsolatos más mennyiségek miként módosulnak.



Anizotróp közegben az erőter energia-impulzus-tenzorának megadásánál az egyik számításba jövő eshetőség a Minkowski-féle aszimmetrikus kifejezés:

$$t_{ik} = \frac{1}{4\pi} \left[ F_{ir} G_{kr} - \frac{1}{4} \delta_{ik} F_{rs} G_{rs} \right]. \quad (30)$$

Ezt a tenzort levezetni nem tudjuk, csak annyit mondhatunk, hogy vákuumban, ahol  $\varepsilon = \mu = 1$ , az Abraham-féle tenzorral együtt ez is átmegy az elektronelmélet ismert

$$T_{ik}^0 = \frac{1}{4\pi} \left[ F_{ir} F_{kr} - \frac{1}{4} \delta_{ik} F_{rs} F_{rs} \right]$$

energia-impulzus-tenzorába. A Minkowski-tenzor egyes komponenseiként adódó feszültség (az  $u$  normálisvektorral jellemzett felületegységre ható erő), a tér-impulzusnak, a térben folyó energiaáramnak és a térenergianak a sűrűsége minden inerciarendszerben a következő alakú:

$$f^M = -t_{**} = \frac{1}{4\pi} \left[ \mathfrak{E}(\mathfrak{D}n) + \mathfrak{H}(\mathfrak{B}n) - \frac{1}{2} n(\mathfrak{E}\mathfrak{J} + \mathfrak{H}\mathfrak{B}) \right],$$

$$\mathfrak{G}^M = \frac{1}{ic} t_{*4} = \frac{1}{4\pi c} \mathfrak{J} \times \mathfrak{B},$$

$$\mathfrak{S} = \frac{c}{i} t_{4*} = \frac{c}{4\pi} \mathfrak{E} \times \mathfrak{H},$$

$$u = -t_{44} = \frac{1}{8\pi} (\mathfrak{E}\mathfrak{D} + \mathfrak{H}\mathfrak{B}).$$

(A \* térbeli indexeket — 1, 2, 3 — jelent.) A *Minkowski* által feltételezett energia-impulzus-tenzor negatív divergenciájaként adódó ponderomotoros erő-sűrűség az izotróp dielektrikum esetéhez hasonlóan

$$f_i = -\partial_k t_{ik} = F_{ik} S_k + \frac{1}{16\pi} (G_{rs} \partial_i F_{rs} - F_{rs} \partial_i G_{rs}). \quad (31)$$

Az első tag a töltésekre ható Lorentz-erőről a második, zárójelben álló kifejezés pedig a dielektrikumok határfelületén fellépő ponderomotoros nyomásról ad számot.

Az elektromágneses tér Lagrange-függvényének ismeretében (4. §.) az általános relativitáselmélet variációs módszerét is alkalmazhatjuk az erőter energia-impulzus-tenzorának meghatározására. A Lagrange-függvénynek  $g^{ik}$  metrikus tenzor szerint végrehajtott variálása a következő energia-impulzus-tenzorhoz vezet:

$$\begin{aligned} T_{ik} = & -\frac{1}{8\pi} (E_i D_k + E_k D_i + H_i B_k + H_k B_i) + \\ & + \frac{1}{4\pi} (F_{ir}^* - u_i B_r) u_k H_r + \frac{1}{4\pi} (F_{kr}^* - u_k B_r) u_i H_r + \\ & + \frac{1}{8\pi} (g_{ik} + 2u_i u_k) (E_r D_r + H_r B_r). \end{aligned} \quad (32)$$

(A tenzor származtatását a nemeuklideszi metrika esetére felírt Lagrange-függvényből a függelékben közöljük.) A most kapott tenzor, izotróp közegnél Abraham által bevezetett energia-impulzus-tenzor általánosításának tekinthető. A tenzor szimmetrikus, mint az minden Lagrange-függvényből származtatott energia-impulzus-tenzornál fennáll. Így a Planck-féle tétel az energia tehetetlenségéről külön az elektromágneses tér energiájára is érvényes, a tér által a dielektrikumra gyakorolt forgatónyomaték is mindíg ponderomotoros erőkre vezethető vissza.

A közeghez képest nyugvó vonatkoztatási rendszerben az általánosított Abraham-féle  $T_{ik}$  tenzor egyes komponenseiként adódó Maxwell-féle feszültségek, a térimpulzus-sűrűség, energiaáram-sűrűség (Poynting-vektor) és a tér-energia-sűrűség  $T_{ik}$  kifejezésének első, második, harmadik, illetve negyedik (zárójellel összefoglalt) tagjából adódik, a következőképpen:

$$f^A = -T_{**} = \frac{1}{8\pi} [\mathfrak{E}(\mathfrak{D}) + \mathfrak{D}(\mathfrak{E}) + \mathfrak{H}(\mathfrak{B}) + \mathfrak{B}(\mathfrak{H}) - \frac{1}{2} n(\mathfrak{E}\mathfrak{D} + \mathfrak{H}\mathfrak{B})],$$

$$\mathfrak{G}^A = \frac{1}{ic} T_{*+} = \frac{1}{4\pi c} \mathfrak{E} \times \mathfrak{H},$$

$$\gamma = \frac{c}{i} T_{+*} = \frac{c}{4\pi} \mathfrak{E} \times \mathfrak{H},$$

$$u = -T_{44} = \frac{1}{8\pi} (\mathfrak{E}\mathfrak{D} + \mathfrak{H}\mathfrak{B}).$$

(Mozgó dielektrikum esetén a fenti mennyiségeknek háromdimenziós vektorokkal felírt kifejezése bonyolultabb lesz.) Látható, hogy a Minkowski- és Abraham-féle tenzorkomponensek  $\mathfrak{E}$ ,  $\mathfrak{D}$ ,  $\mathfrak{H}$ ,  $\mathfrak{B}$  hármasektorokkal kefejezett alakja anizotróp közegekben nem különbözik az izotróp közegekben megismert kifejezésektől.

Az Abraham-féle szimmetrikus tenzorból adódó ponderomotoros erő kifejezését áttekinthetőség kedvéért arra a speciális, de gyakorlatilag legfontosabb esetre írjuk fel, amikor a közeg mágneses polározhatósága figyelmen kívül hagyható. (22) egyenlet.) Ebben az esetben a szimmetrikus tenzornak Lagrange-függvényből való származtatása is egyszerűbb (lásd a függelék), az eredmény:

$$T_{ik} = \frac{1}{4\pi} [F_{ir}F_{kr} + E_iE_k - \frac{1}{2} (E_iD_k + E_kD_i) - u_iu_kE_r(E_r - D_r) - \frac{1}{2} \delta_{ik}F_{rs}G_{rs}]. \quad (33)$$

Figyelembe véve a  $t_{ik}$  Minkowski-féle tenzor (30) alatt felírt alakját, valamint bevezetve az elektromos polarizáció jellemzésére a

$$P_i = \frac{1}{4\pi} (D_i - E_i)$$



vektort,  $T_{ik}$ -nak a következő alakjára juthatunk:

$$\begin{aligned} T_{ik} &= t_{ik} - (F_{ir} - u_i E_r) u_k P_r + \frac{1}{2} (E_i P_k - E_k P_i) = \\ &= t_{ik} + i \delta_{iruv}^* u_k u_r P_u B_v + \frac{1}{2} (E_i P_k - E_k P_i). \end{aligned}$$

A most felírt Abraham-tenzor negatív divergenciájaként adódó ponderomotoros erősűrűség két tagban különbözik a Minkowski-féle, (31) alatt nyert kifejezéstől:

$$K_i = -\partial_k T_{ik} = f_i - i u_k \partial_k (\delta_{iruv}^* u_r P_u B_v) + \frac{1}{2} \partial_k (E_i P_k - E_k P_i).$$

Az utolsóelőtti tag az *Abraham* által bevezetett és nyugvó (izotróp) közegben

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\varepsilon - 1}{4\pi c} \mathfrak{E} \times \mathfrak{B} \right) = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\mathfrak{P} \times \mathfrak{B}) = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathfrak{P}}{\partial t} \times \mathfrak{B} + \frac{1}{c} \mathfrak{P} \times \frac{\partial \mathfrak{B}}{\partial t}$$

alakban ismert erősűrűség-kifejezés. Ez a  $\partial \mathfrak{P} / \partial t$  polarizációs áramra mágneses tér által kifejtett Lorentz-erőt és a *Frenkel* által bevezetett\* (az elektromágneses hatás véges terjedési sebességével magyarázható) retardációs tagot egyesíti magában. A legutolsó, új tag csak anizotróp közegben lép fel,  $E_i$ -nek  $P_i$ -vel nem párhuzamos volta folytán adódó forgatónyomatékkal kapcsolatos.

Annak részletes vizsgálatába, hogy a Minkowski-féle vagy a szimmetrikus energia-impulzus-tenzor írja le helyesebben a dielektromos közegekben végbemenő jelenségeket, most nem bocsátkozunk.

## 6. §. Összefoglalás

Az elmondottakból látszik, hogy anizotróp közegekben az elektromágneses tér elmélete a nemrelativisztikus összefüggésekből kiindulva éppen olyan egyértelmű és relativisztikusan invariáns módon kiépíthető, mint azt izotróp közegben *Minkowski* elvégezte. A Maxwell-egyenletek változatlanok maradnak, csak a tér polározhatóságát kifejező anyagi egyenletek módosulnak mozgó közeg esetében. Problematisz marad az erőter energia-impulzus-tenzorának és a ponderomotoros erőnek pontos kifejezése, de ez még a nemrelativisztikus elméletben, illetve az izotróp dielektrikumok relativisztikus elektrodinamikájában is vitatott kérdés. Az utóbbi probléma vizsgálatára egy későbbi dolgozatban szeretnék visszatérni.

Köszönettel tartozom *Novobátszky Károly* akadémikusnak a vizsgált problémakörben nyújtott sok értékes útbaigazításáért, ezenkívül *Györgyi Géza* kartársamnak, amiért egyes, a dolgozatban tárgyalt kérdésre felhívta a figyelmet.

\* Lásd J. Frenkel, loc.cit.<sup>7</sup>, 91.

## FÜGGELÉK

### Az Abraham-féle tenzor származtatása Lagrange-függvényből

Anizotróp közeg esetén az elektromágneses tér Lagrange-függvényét (28) alatt felírtuk. Nemeuklideszi metrikában, különbséget téve kovariáns és kontra-variáns tenzor között, a Lagrange-függvény alakja a következő:

$$L = \frac{1}{16\pi} G_{ab} F^{ab} - \varphi_r s^r.$$

A Lagrange-függvény négyes térfogatra való integráljának a  $g^{ik}$  metrikus tenzor szerint való variálása meghatározza az energia-impulzus-tenzort:

$$\delta S = \delta \int L \sqrt{g} dx = \frac{1}{2} \int T_{ik} \delta g^{ik} \sqrt{g} dx. \quad (34)$$

(Itt  $dx = dx^1 dx^2 dx^3 dx^4$  jelöli.) Figyelembe véve  $G_{ab}$  alakját, a variálandó integrál nemeuklideszi metrika esetén a következő:

$$S = \int \left[ \frac{1}{32\pi} F_{ab} \frac{\delta^{*abrs}}{\sqrt{g}} \frac{\delta^{*mnur}}{\sqrt{g}} u_r z_{sm} u_n F_{ur} - \frac{1}{8\pi} \varepsilon^{rs} E_r E_s - \varphi_r \frac{s^r}{\sqrt{g}} \right] \sqrt{g} dx.$$

Az integrál felírásánál figyelembe vettük, hogy az 1.§-ban bevezetett  $\delta^{*ikrs}$  mennyiség általános koordinátatranszformációk során kontravariáns tenzorsűrűségként viselkedik, tehát  $\sqrt{g}$ -vel osztva ad tenzort. Ugyanez vonatkozik az  $s^r$  áramsűrűségre.

Hogy a  $g^{ik}$  metrikus tenzor szerint a variációt elvégezhessek, célszerű lesz az integrandust, mint a  $g^{ik}$  metrikus tenzorkomponensek és a metrikától független mennyiségek kombinációját felírni. Tudjuk, hogy  $\varphi_i, F_{ik}, s^r, u^k, F_i = F_{ik} u^k$  a  $g^{ik}$  tenzor komponenseit nem tartalmazzák. Ebből következik, hogy az

$$\delta^{*ik} = -\frac{i}{2} \delta^{*ikrs} F_{rs}$$

tenzorsűrűség is  $g^{ik}$ -től független. (Kérdéses marad, hogy  $\varepsilon^{rs}$  és  $z_{rs}$  miként függ  $g^{ik}$ -től.) Mindezt figyelembe véve  $S$ -nek  $g^{ik}$ -től való függését a következő felírás juttatja kifejezésre:

$$S = \int \left[ \frac{-1}{8\pi\sqrt{g}} \delta^{*rs} \delta^{*mn} u^a z_{sm} (g^{ik}) u^b g_{ar} g_{bn} - \frac{1}{8\pi} \varepsilon^{rs} (g^{ik}) \mathcal{E}_r \mathcal{E}_s \sqrt{g} - \varphi_r s^r \right] dx.$$

Hajtsuk végre a variációt  $g^{ik}$  szerint. Az ismert módszer szerint eljárva, az alábbi eredményre jutunk:

$$\delta S = \int \frac{1}{8\pi} \left[ F_{ir}^* u_k H^r + F_{kr}^* u_i H^r + B^r B^s \frac{\partial z_{rs}}{\partial g^{ik}} - E_r E_s \frac{\partial \varepsilon^{rs}}{\partial g^{ik}} + \frac{1}{2} g_{ik} (E_r D^r + H_r B^r) \right] \delta g^{ik} \sqrt{g} dx.$$



Ebből leolvashatjuk a keresett energia-impulzus-tenzor alakját:

$$T_{ik} = \frac{1}{4\pi} \left[ F_{ir}^* u_k H^r + F_{kr}^* u_i H^r + B^r B^s \frac{\partial z_{rs}}{\partial g^{ik}} - \right. \\ \left. - E_r E_s \frac{\partial \varepsilon^{rs}}{\partial g^{ik}} + \frac{1}{2} g_{ik} (E_r D^r + H_r B^r) \right].$$

Kérdéses maradt még  $z_{rs}$  és  $\varepsilon^{rs}$  kifejezése. Ezek meghatározásánál azt az ismert körülményt tarthatjuk szem előtt, hogy az elektromágneses tér energia-sűrűségének közeghez képest nyugvó vonatkoztatási rendszerben

$$u = -T_{44} = \frac{1}{8\pi} (\mathfrak{E} \mathfrak{D} + \mathfrak{H} \mathfrak{B})$$

értékűnek, a Poynting-vektornak

$$\mathfrak{S} = \frac{c}{i} T_{4*} = \frac{c}{4\pi} \mathfrak{E} \times \mathfrak{H}$$

értékűnek kell lennie. Az izotróp dielektrikumban Novobátzky által követett eljáráshoz hasonlóan  $z_{rs}$  és  $\varepsilon^{rs}$  alakját így vesszük fel<sup>2</sup>:

$$z_{rs} = z_r^t g_{ts} (2 + g_{mn} u^m u^n), \quad \varepsilon^{rs} = \varepsilon_r^t g^{ts} (2 + g_{mn} u^m u^n),$$

ahol most már  $z_r^t$  és  $\varepsilon_r^t$  metrikától független. Ennek alapján adódik:

$$B^r B^s \frac{\partial z_{rs}}{\partial g^{ik}} = -u_i u_k B_r H^r - \frac{1}{2} (B_i H_k + B_k H_i), \\ E_r E_s \frac{\partial \varepsilon^{rs}}{\partial g^{ik}} = -u_i u_k E_r D^r + \frac{1}{2} (E_i D_k + E_k D_i).$$

Mindezt behelyettesítve kapjuk az energia-impulzus-tenzor következő alakját:

$$T_{ik} = \frac{1}{4\pi} \left[ -\frac{1}{2} (E_i D_k + E_k D_i + H_i B_k + H_k B_i) + (F_{ir}^* - u_i B_r) u_k H^r + \right. \\ \left. + (F_{kr}^* - u_k B_r) u_i H^r + \left( \frac{1}{2} g_{ik} + u_i u_k \right) (E_r D^r + H_r B^r) \right].$$

Ezt a szimmetrikus tenzort tekinthetjük az Abraham-féle energia-impulzus-tenzor anizotróp közegben is érvényes alakjának, erre hivatkoztunk (32) alatt.

Ha a közeg mágnesesen nem polárizható, az energia-impulzus-tenzor származtatása lényegesen egyszerűbb. A (22) egyenletet felhasználva, a Lagrange-függvény így írható fel:

$$L = \frac{1}{16\pi} F_{ab} G^{ab} - q_r s^r = \frac{1}{16\pi} F_{ab} F_{ar} g^{ar} g^{br} + \\ + \frac{1}{8\pi} (2 + g_{mn} u^m u^n) E_r E_s (g^{rs} - \varepsilon_r^t g^{ts}) - q_r \frac{\mathfrak{S}^r}{\sqrt{g}}.$$

Itt  $g^{ik}$ -kon kívül csupa metrikától független kifejezés szerepel. A (34) által megadott eljárás szerint képezve az energia-impulzus-tenzort a következő eredményre jutunk:

$$T_{ik} = \frac{1}{4\pi} \left[ F_{ir} F_{kr} + E_i E_k - \frac{1}{2} (E_i D_k + E_k D_i) - u_i u_k E_r (E^r - D^r) - \frac{1}{4} g_{ik} F_{rs} G^{rs} \right].$$

Erre hivatkoztunk (33) alatt.

#### IRODALOM

<sup>1</sup> *I. E. Tamm*, Journ. of Phys. USSR. *1*, (1939), 439. — *I. F. Tamm*: Osznovi teorii elektricsesztva (Gosztehizdat, Moszkva-Leningrád, 1949). — Mivel az első közlemény Magyar országon nem állt rendelkezésre, az idézett tankönyvet vettem figyelembe.

<sup>2</sup> *K. F. Novobátzky*, Hung. Acta Phys. *1*, (1949), 5.

<sup>3</sup> *M. v. Laue*, Z. Phys. *128*, (1950), 387.

<sup>4</sup> *G. Rosenberg*, Uszpehi Fiz. Nauk *44*, (1951), 453.

<sup>5</sup> *H. Ott*, Ann. Phys. VI. *11*, (1952), 33.

<sup>6</sup> *F. Beck*, Z. Phys. *133*, (1953), 580.

<sup>7</sup> *J. Frenkel*: Lehrbuch der Elektrodynamik (Springer, 1928.) 37.

<sup>8</sup> *G. Marx*, Acta Phys. Hung. *2*, (1952), 67.





# A FOLYÓIRODALOMBÓL

## MEGMARAD-E A KVANTUMFIZIKA INDETERMINISTA JELLEGE?\*

LOUIS DE BROGLIE

Egyik tanulmányomban, mely a *Revue de Métaphysique et de Morale*-ban jelent meg *Személyes visszaemlékezések a hullámmechanika kezdetére* címen, felidéztem, milyen szellemi állomásokon mentem keresztül 1923 és 1928 között a hullámmechanika értelmezésével kapcsolatban és kifejtettem, miképpen kíséreltem meg olyan konkrét és determinista értelmezés kialakítását, mely nagy vonásaiban egyezik a fizika hagyományos fogalmaival, de a nehézségek következtében, melyekkel szembe találtam magam és az ellenvetések hatása alatt, melyeket nekem tettek, végül csatlakoztam Bohr és Heisenberg valószínűségi és indeterminista álláspontjához. Közel huszonöt esztendőn keresztül hű maradtam ehhez a felfogáshoz, melyet egyébként az elméleti fizikusok szinte egyhangúan magukévá tettek és ezt hirdettem az oktatásban, előadásaimban és könyveimben. 1951 nyarán kellemes ismeretséget kötöttem egy tanulmány szerzőjével, David Bohm fiatal amerikai fizikussal. Tanulmánya később a *Physical Review* 1952. január 15-i számában jelent meg. Ebben a tanulmányban Bohm teljes egészében újra közli 1927-es gondolataimat, méghozzá ugyanabban a formában, amint azt én tettem, néhány ponton rendkívül érdekesen egészítve ki azokat. Majd J. P. Vigier hívta fel a figyelmet arra a hasonlóságra, mely fennáll Einsteinnek a speciális és általános relativitáselméletében adott egyik bizonyítása és az én egyik 1927-ből származó, teljesen független bizonyításom között, melyet az általam a „kettős megoldás elméletének“ nevezett tanulmányban közöltem. Mindezek a körülmények figyelmemet az utóbbi időben ezen kérdések felé terelték és bár nem akarom azt mondani, hogy vissza lehet állítani a hullámmechanika determinista felfogását az én primitív elgondolásaim szerint, mégis azt hiszem, hogy a kérdést újabb vizsgálat tárgyává kell tenni és óvakodva minden filozófiai előítélettől, csupán annak a kutatásával kellene foglalkozni, hogy lehetséges-e ilyen módon összefüggő, minden tényre kiterjedő értelmezést nyerni. Ha a problémát úgy akarjuk felállítani, amint az ma elénk tárul, úgy láttam, hogy a legeredményesebb, ha történeti alapon végig követjük a kvantumfizika új fogalmainak fejlődését.

Korunk mikrofizikájának drámai pillanata — amint mondani szokás — az volt, amikor felfedezték a hullámok és a részecskék kettős természetét. Ez

\* Megjelent Les Grands problèmes des sciences sorozatban 1953-ban.



a kettősség a fény tulajdonságainak vizsgálata alkalmából vált nyilvánvalóvá. Hosszú időn keresztül természetesnek látszott az a gondolat, hogy a fény gyorsan mozgó részecskékből áll. A fénysugarak létezése, melyek homogén közegben egyenes vonalban terjednek, visszaverődésük tükörfelületekről, hasonlóan egy labdának a falról való visszaverődéséhez, törésük, amikor egyik közegből átlépnek a másikba, mindez könnyen, ösztönös módon magyarázható volt. A fénynek ezt a korpuszkuláris elméletét, melyhez Newton is csatlakozott, a fizikusok legnagyobb része is elfogadta, egészen a 19. század végéig. Meg kell azonban közben jegyeznünk, hogy a 17. század vége felé a nagy holland tudós, Christian Huyghens a fény hullámelméletének kifejtését kezdeményezte és a visszaverődés, törés, kettőstörés jelenségeire, valamint a nevét ma is viselő elvre vonatkozólag a mai napig is klasszikusnak tekintendő értelmezést adott a hullámfelfogás alapján, anélkül, hogy a fénysugarak természetére megpróbált volna magyarázatot adni. Meg kell még jegyezni azt is, hogy Newton, miután felfedezte azokat az interferencia jelenségeket, melyeket ma is Newton-féle gyűrűknek neveznek, megkísérelte egy rendkívül érdekes magyarázat adását mind a hullámokra, mind a korpuszkulákra vonatkozólag a „fénylökések elméletében“, mely azonban sajnálatos módon embrionális állapotban maradt és ily módon gyorsan feledésbe merült. A 19. század elején Thomas Young, angol orvosnak a munkássága felhívta a figyelmet az interferenciajelenségekre és nem sokkal ezután Malus felfedezte a fény polarizációját. Augustin Fresnel az interferenciának, valamint a fényelhajlásnak a 17. század óta ismert, de kevésbé vizsgált jelenségeivel foglalkozott kísérleti alapon. Augustin Fresnel kimutatta, hogy ezeket a jelenségeket kizárólag a fény hullámelmélete alapján lehet értelmezni és a fény korpuszkuláris felfogása alapján mindezekről teljesen lehetetlen számot adni. Kiegészítve Huyghens munkásságát, bebizonyította azt is, hogy a hullámelmélet értelmezni tudja a fénysugaraknak homogén közegben való egyenesvonalú terjedését. Majd, heves küzdelem után Fresnel, meggyőzvé ellenfeleit, bevezette azt a hipotézist, mely szerint a fényhullámban a rezgés a tovaterjedés irányára merőleges, azonkívül a mai napig is klasszikusnak tekinthető teljes elméletét adta a polarizáció és a kettős törés jelenségeinek. Fresnel 1827-ben, 39 éves korában tüdőbajban meghalt és úgy látszott, hogy a fény hullámelméletét megrendíthetetlen alapokra helyezte. 40 évvel később Maxwell a Fresnel-féle hullámoknak elektromágneses értelmezést adott és miután kimutatta, hogy minden fényhullám egy sajátos jellegű elektromágneses perturbáció, az egész optikát az elektromagnetizmusra vezette vissza. Maxwell lánghű szintézise azonban, ha meg is változtatta a fényhullámok természetére vonatkozó gondolatokat, érintetlenül hagyta azt a valamennyi fizikus által vallott nézetet, mely szerint a fény olyan hullámokból áll, melyekben az energia folytonosan oszlik el.

Ezek után a 19. század utolsó éveiben folytatódik a dráma. A Hertz által 1889-ben felfedezett fotoelektromos effektus szolgáltatja az első példát a



fény és anyag kölcsönhatására, melyet a fény hullámfelfogása alapján nem lehet értelmezni. 1905-ben Albert Einstein, a relativitáselmélet jövődő felfedezője, megmutatja, hogy a fotoelektromos effektus értelmezhető, ha legalább részben visszatérünk a fény korpuszkuális elméletéhez, feltéve, hogy minden  $\nu$  frekvenciájú fényhullámban az energia  $h\nu$  értékű „részecskékben“ egyesül, ahol  $h$  a kvantumállandó, melyet Planck vezetett be a fekete sugárzás elméletébe: ezeket a fényrészecskéket, vagy amint Einstein nevezte őket, a „fénykvantumok“-at ma „fotonok“-nak nevezzük. Einstein azonban belátta, hogy elmélete nem szigorúan korpuszkuális jellegű elmélet, mivel abban a frekvencia fogalma is előfordul, mely kimondottan hullámtani eredetű. Viszont egy kimondottan korpuszkuális elmélet alapján nem lehet az interferencia és a diffrakció jelenségeit értelmezni, ezért Einstein azt állította, hogy fenn kell tartani a fény hullámfelfogását és a hullámok és részecskék között ki kell építeni egy megfelelő statisztikát, mely — mint látni fogjuk — igen mélyenjáró gondolat volt.

Einstein elméletét élénk kritika tárgyává tették, mivel könnyen ki lehetett mutatni annak nehézségeit. Értékét azonban emelte az, hogy szorosan kapcsolódott ahhoz a hatalmas gondolatmenethez, mely már akkor folyamatban volt, hogy felforgassa az egész atomfizikát: a kvantumelméletéhez. Emlékszem, hogy a fekete test sugárzásának kísérleti vizsgálata megmutatta, hogy ennek a sugárzásnak a spektrális összetétele egyáltalában nem olyan, mint azt a klasszikus elmélet alapján előre lehetne látni. Planck, miután alaposan meggyőződött róla, hogy az eltérés teljes és feloldhatatlan, 1900-ban bevezette a kvantumhipotézist, mely teljesen idegen és összeegyeztethetetlen volt a klasszikus fogalmakkal és amely lehetővé tette számára, hogy megtalálja a fekete test sugárzásának olyan spektrális eloszlási törvényét, mely jól egyezett a tapasztalattal. Ebben a kvantumhipotézisban a mechanikai hatásnak olyan atomisztikus felfogásáról volt szó, mely teljesen új fogalom volt és kevésbé illett fizikai elképzeléseinkhez. A hatáskvantum mértéke  $h$ , a híres „Planck-féle állandó“, melynek számértékét Planck a fekete testre vonatkozó experimentális adatoktól tudta meghatározni. A kvantumhipotézis, bármily furcsának is tűnt fel eleinte, hamarosan döntő fontosságra tett szert az atomi folyamatokkal kapcsolatos jelenségek területén. Einstein a fénykvantumokra vonatkozó elméletében használta fel: azonkívül kimutatta fontosságát a fájó területén is. Csakhamar Bohr és közvetlen követői, akiknek a vezetője Sommerfeld volt, kimutatták, hogy ha a Rutherford-féle atommodell elméletébe, mely az atomot miniatűr naprendszernek tekintette, bevezetik a kvantumokat, az atom tulajdonságainak érdekes értelmezése nyerhető, különösen a színeképekben mutatkozó törvényekre vonatkozólag. Ezeknek az elméleteknek, melyekre most nem térek ki, az volt az eredménye, hogy a mikrofolyamatokban az elektronok és a többi anyagi részecskék nem követik a klasszikus mechanika törvényeit, amint azt addig hitték, hanem csak olyan meghatározott mozgási állapotokban



lehetnek (Bohr-féle stacionárius állapotok), melyek eleget tesznek az úgynevezett „kvantumfeltételek”-nek, ahol — természetesen a  $h$  konstans mellett — egész számok, a kvantumszámok szerepeltek. Az egész számoknak ez a megjelenése a mikromechanikában nagyon meglepőnek tűnhetett fel, mivel azonban gyakran jelennek meg egész számok a hullámok elméletében, az interferencia és rezonancia jelenségeivel kapcsolatos számításoknál, ez kedvezni látszott annak a gondolatnak, hogy az elektronokra és más anyagi részekre hasonlóan, mint a fotonokra és fénysugarakra, szintén fennáll a hullám-részecske kettősség. Ez volt az a gondolat, mely első hullámmechanikai kutatásaimban vezetett.

1920 táján, amikor hosszú katonai szolgálat után újra kezdtem tudományos kutatásaimat, a helyzet tehát a következő volt. Egyrészt a fotonok létezése, melyet újabban megerősített a Compton és a Raman effektus felfedezése, bizonyosnak látszott, szükség volt azonban a hullámelméletre is, hogy bevezethető legyen a frekvencia, mely a foton meghatározásában szerepel és hogy számot lehessen adni az interferencia- és diffrakciójelenségek összességéről, melynek törvényeit rendkívül nagy pontossággal meghatározták; mindez olyan szintetikus látásmód szükségességére mutatott, mely kifejezi a fény hullám-részecske-szerű kettősséget. Másrészt a korpuszculák kvantált mozgása az atomi folyamatokban arra a gondolatra utalt, mint már mondtam, hogy a hullám-részecske kettősséget bevezessék az elektronokra és más anyagi részecskékre vonatkozólag is. Nyilvánvalónak látszott tehát előttem, hogy egy olyan általános szintézist kell megvalósítani, mely egyaránt alkalmazható mind az anyagra, mind a fényre, olyan képleteket állítva fel, melyekben szükségképpen szerepel a Planck-féle  $h$  konstans és mely a részecske és hullám fel fogást felbonthatatlanul összefűzi.

Ennek a szintézisnek vetettem meg az első alapjait abban a cikkemben, mely a *Comptes rendus de l'Académie des Sciences*-ban jelent meg 1923 novemberében, valamint részletesebben kifejtve doktori értekezésemben 1924 novemberében. Relativisztikus megfontolásoktól, valamint azoktól a gondolatoktól vezetve, melyeket Hamilton fejtett ki egy századdal előbb, arra az eredményre jutottam, hogy minden korpuszkula mozgásához egy hullám terjedését rendeljem, melynek frekvenciáját és hullámhosszát egy olyan képlet kapcsolja össze a részecske energiájával és impulzusával, melyben szerepel a  $h$  konstans és kimutattam, hogy ilyen módon érthetővé válik az, hogy az elektronok az atomban kvantált módon mozognak. Anélkül, hogy belemennék itt a technikai részletekbe, a következő álláspontot foglaltam el. Valamely részecske egyenes vonalú, egyenletes mozgását, ha nincs jelen elektromágneses tér, kapcsolatba hoztam egy monokromatikus síkhullám terjedési irányával, melynek amplitúdója állandó és melynek fázisa lineáris  $x, y, z, t$ -ben. Ahogy kapcsolatot teremtettem a korpuszkula energiája és impulzusa között egyrészt, valamint a hullám frekvenciája és hullámhossza között, másrészt, úgy kapcsoltam össze a részecske mozgásállapotainak összességét a hullám fázisával. Hogyan



egyeztethető azonban össze a hullámmal az a tény, hogy a részecske lokalizált, hogy a térben meghatározott helyzete van? Nehezen megoldható kérdés, mivel a monokromatikus síkhullámnak a tér minden pontjában ugyanaz az amplitúdója lévén, semmiképpen sem lehet meghatározni minden időpillanatra egy kitüntetett pontot, mely megadja a részecske helyzetét ebben a pillanatban. Ez a nehézség, néhány relativisztikus megfontolással együtt, melyeket itt mellőzök, arra a gondolatra készítetett, hogy ha a monokromatikus síkhullám fázisának meghatározott fizikai értelme is van, ez nem áll ennek a hullámnak a konstans amplitúdójára: az amplitúdónak egyenletes eloszlása a térben egyszerűen azt jelenti, hogy a részecske *a priori* a tér tetszésszerű pontján található egyforma valószínűséggel. Az amplitúdó tehát nem egyéb, mint a részecske valódi helye valószínűségének a mértéke (mert akkoriban nem kételkedtem benne, hogy e helyzetnek minden időpillanatban léteznie kell), és nem ábrázolja azt. Ezenkívül az általam bevezetett hullámnak a „fázishullám” nevet adtam, ezzel akarván kihangsúlyozni, hogy az én szememben lényegében a fázis az, amelynek fizikai értelme van.

Azok a gondolatok, melyeket értekezésemben összefoglaltam és amelyeket előzőleg kétség kívül némi megdöbbenéssel, vegyes kétkedéssel gyűjtöttem össze, időközben ragyogó megerősítést nyertek. Elsősorban Schrödinger csodálatos munkáinak elméleti felfogásában, aki 1926-ban kiegészítette és különféle módokon kiterjesztette az én elgondolásomat, különösen avval, hogy kimutatta, hogy kell általános esetben felírni a kísérő hullám terjedésének egyenletét és hogyan kell ezen egyenletek segítségével pontosan kiszámítani atomi folyamatok esetében az elektronok stacionárius állapotait, melyek megfelelnek a kísérő hullám stacionárius állapotainak. Kimutatta azt is, hogy a kvantummechanika, melyet 1925-ben Heisenberg dolgozott ki, nem egyéb, mint a hullámmechanika egy matematikai változata.

Ezután következtek Davisson és Germer nem kevésbé csodálatos kísérletei, akik az Egyesült Államokban 1927 tavaszán felfedezték elektronoknak kristályokon való diffrakcióját, mely teljesen hasonló jelenség volt, mint röntgensugaraknak kristályokon való elhajlása. Ezek a szép kísérletek, melyeket csakhamar számos fizikus megismételt és melyek ma már bekerültek a napi laboratóriumi gyakorlatba, döntő experimentális bizonyítékát adták a hullámmechanikai felfogásnak, valamint kvantitatív igazolását a hullámmechanikai formuláknak. Az elektron mozgásához tehát helyesen rendelünk egy hullámot és ma már tudjuk, hogy ez így van az anyag egyéb alkotórészeinél is (proton, neutron, atommagok stb.), melyek szintén mutathatják a diffrakció jelenségeit, amint azt a hullámmechanika előre megjósolta.

Ebben az időszakban, mely dolgozatom benyújtásától, 1924 novemberétől az 5. Solvay kongresszus 1927 októberi üléséig tartott, természetesen szenvedélyes érdeklődéssel követtem a hullámmechanika fejlődésének minden állomását, közben azonban állandóan gyötört az új elméleti formalizmus fizikai



értelmezésének kérdése és hogy mi a reális értelme a hullám-részecske kettősségnek. Tudomásom szerint e dualitás minden lehetséges értelmezését figyelembevették. Egyik értelmezés, melyet Schrödinger mindig előnyben látszott részesíteni, az volt, mely tagadta a kettősség reális voltát és kétségbevonta a korpuszculák létezését. Egyedül a hullámoknak van fizikai jelentőségük, mely hasonló a klasszikus fizika hullámaiéhoz. Bizonyos esetekben a hullámok terjedése korpuszculáris megjelenési formát ölt, de ez csupán látszat. Kezdetben, hogy ezt a gondolatát pontosabban kifejtse, Schrödinger a részecskét kis *hullám-csomaghoz* akarta hasonlítani, ez az értelmezés azonban nem volt fenntartható, mert egy hullámcsomag mindig arra törekszik, hogy gyorsan, szünet nélkül minél jobban szétterüljön a térben és ezért nem ábrázolhat egy olyan részecskét, melynek nagyobb stabilitása van. Annak ellenére, hogy Schrödinger ma is ragaszkodni látszik az ilyen jellegű értelmezésekhez, én a magam részéről nem hiszem, hogy ezek elfogadhatók, hanem úgy gondolom, hogy a részecske-hullám kettősséget mint fizikai tényt kell elfogadni. Pontosabban, a másik két értelmezés, amelyekre céloztam, elfogadja ezt a kettősséget reálisnak, de azt egészen más szemszögből nézi.

Az első értelmezés, melyet 1928-ig vallottam, abban áll, hogy a hullám-részecske kettősségnek konkrét jelentőséget tulajdonítunk, a fizika hagyományos gondolkodásmódjának megfelelően és a részecskét úgy tekintjük, mint valamely szingularitást egy kiterjedt hullámtérben, melynek a részecske a középpontja. A nehézség már most annak megértése, hogyan vezethet sikerre a hullámmechanika, mely *folytonos*, szingularitás nélküli hullámokkal dolgozik, olyan fajta folytonos hullámokkal, mint a fény klasszikus elméletében. Röviden ismertetni fogom, milyen formában próbáltam ezt az elképzelést tovább fejleszteni.

A hullám-részecske kettősségnek második értelmezése szerint nem kell figyelembe venni a részecske és a folytonos hullám gondolatát, hanem úgy kell ezeket tekinteni, mint a valóság „komplementáris arculatait“, abban az értelemben, ahogy Bohr ezt a kifejezést alkalmazta. Magam is hamarosan elfogadtam ezt az érdekes nézetet, mely teljesen különbözik a klasszikus fizika fogalmaitól, és amely huszonöt esztendőn keresztül a hullámmechanika „ortodox“ értelmezését alkotta.

Egy pillanatra visszatérek történeti összefoglalásomhoz. 1924-ben, az értekezésem benyújtását követő napokban, teljesen áthatottak a klasszikus fizika fogalmai és ezeknek a fogalmaknak a keretében, azaz a jelenségek kartéziánus ábrázolásának keretében „számok által és mozgás által“ kerestem az általam felvetett új gondolatok értelmezését. Bizonyosnak tűnt fel előttem, hogy a részecskének minden pillanatban meg kell hogy legyen a helye és a sebessége a térben, tehát az idő folyamán egy pályát ír le. Épp oly biztos voltam abban is, hogy egy periodikus, hullámszerű jelenséghez kapcsolódik, mivel a mellérendelt hullámnak ki lehet számítani a frekvenciáját és a hullámhossz-



szát. Ezért egészen természetesen úgy képzeltem el a részecskét, mint a hullámtér egy szingularitását, melyek mind egyetlen fizikai valóságot alkotnak. Mivel a szingularitás a hullám kialakulásával volt kapcsolatos, melynek középpontjában volt, ezért a részecske mozgása mindazon körülményektől függött, melyekkel a hullám a térben való terjedése közben találkozott. Ez volt az oka, hogy a részecske mozgása egyáltalában nem követte a klasszikus mechanika törvényeit, mely tisztán pontszerű mechanika, melyben a részecske csupán azon erőknek engedelmeskedik, melyek rá pályája mentén hatnak, anélkül, hogy azoknak az akadályoknak a létezése hatással lenne rá, amelyek pályáján kívül vagy attól távol találhatók: ezzel szemben az én felfogásomban a szingularitás mozgását befolyásolta minden olyan akadály, mely a részecskéhez tartozó hullám terjedését befolyásolta, és így magyaráztam meg az interferencia és a diffrakció létrejöttét.

A nehézség azonban annak megértése volt, miért fejlődött úgy a hullámmechanika, hogy a tovaterjedés egyenleteinek kizárólag a folytonos megoldásait veszi figyelembe, minden szingularitás nélkül, olyan megoldásokat, melyeket a  $\psi$  görög betűvel szokás jelölni. Már mondtam, hogy amíg a részecske egyenesvonalú, egyenletes mozgásához egy hullámnak, egy  $\psi$  monokromatikus síkhullámnak a terjedését rendeltem, a következő nehézségbe ütköztem: a hullám — mely lehetővé tette számomra, hogy a részecskét kísérő hullámnak a frekvenciáját és hullámhosszát meghatározzam — fázisának szerintem közvetlen fizikai értelme volt, míg a konstans amplitudó az én szememben csupán a korpuszkula lehetséges helyzeteinek statisztikai eloszlását adta meg. Az individuálisnak és a statisztikainak oly keveréke volt itt, mely nyugtalanított és amelyet sürgősen fel kellett deríteni.

Ha megnézzük azokat a tanulmányokat, melyeket erről a tárgyról közzétettem 1924 és 1927 között, látható, amint a gondolataim egyre inkább abba az irányba terelődnek, melyet akkor a „kettős megoldás elméletének“ neveztem el. Ezt egy cikkemben fejtettem ki, mely 1927 májusában jelent meg a *Journal de Physique*-ben, (8. 1927, 225. old.) mely ebben a kérdésben az egyetlen teljes bizonyíték, mely fennmaradt.

Ebben a tanulmányban merészen azt követeltem, hogy a hullámmechanika egyenleteinek minden folytonos megoldását ki kell egészíteni egy  $u$  szinguláris megoldással, ahol  $u$  egy általában mozgó szingularitást jelent (a részecskét!) és amelynek a fázisa azonos a  $\psi$  megoldás fázisával. A két megoldásnak,  $u$ -nak és  $\psi$ -nek hullámalakja és fázisa legyen az  $x, y, z, t$ -nek a függvénye, de az amplitudójuk legyen teljesen különböző, mivel  $u$ -é egy szingularitást fejezzen ki, míg  $\psi$ -é legyen folytonos. Kiindulva abból, hogy a tovaterjedés egyenletét azonosnak tételeztem fel  $u$ -ra és  $\psi$ -re, egy alapvető tételt bizonyítottam be:  $u$  mozgó szingularitásának az idő folyamán egy olyan pályát kell leírnia, melynek minden pontjában a sebesség arányos kell, hogy legyen a fázis gradienseivel. Azt lehet tehát mondani, hogy a hullám terje-



désének hatása így kapcsolódik a szingularitáshoz, mely annak középpontját alkotja. Azt is kimutattam, hogy ezt a hatást úgy lehet kifejezni, hogy a részecske-szingularitást egy „kvantált potenciálnak“ alávetettnek tekintjük, mely matematikailag pontosan kifejezi a hullám hatását a részecskére. Ezenkívül a fény régi korpuszkuláris elmélete védelmezőinek egy gondolatához csatlakoztam, akik azt mondták, hogy amikor a fénysugár egy ernyő szélén elhajlik, a fényrészecske kölcsönhatásba lép az ernyő szélével és ezért eltér egyenesvonalú pályájától.

Tehát a mozgó szingularitású  $u$  hullám alkotja a részecskét és az azt körülvevő hullámot. Mi az értelme azonban a  $\psi$  hullámnak? Számomra nem volt semmi fizikai realitása, mivel a fizikai realitást az  $u$  hullám írta le. Mivel azonban feltettem, hogy az  $u$  hullámnak ugyanaz a fázisa, mint  $\psi$ -nek, és hogy a részecske-szingularitás úgy halad, hogy követi a fázis gradiensét, a részecske lehetséges trajektóriái összeesnek  $\psi$  azonos fázisú felületeinek orthogonális görbéivel; így könnyen kimutattam, ez oda vezet, hogy annak a valószínűsége, hogy a részecske egy ponton található, egyenlőnek vehető az amplitúdó négyzetével, a  $\psi$  hullám intenzitásával. Ez volt az első lényeges sajátosság, melyet a  $\psi$  hullámnak tulajdonítottak: amplitúdójának négyzete  $|\psi|^2$  egy pontban meg kell hogy adja a valószínűségét a mellérendelt részecske jelenlétének. Ez az elv, melyet a hullámmechanika kezdetén kimondtak és mely szükséges volt az elektronok elhajlásának értelmezéséhez, eleinte nem volt egyéb, mint közvetlen alkalmazása annak, amit az optikában már rég kimondtak. A fény hullámelméletének valóban egyik leglényegesebb elve az volt, hogy a sugárzó energia sűrűségét a fényhullám amplitúdójának a négyzete adja meg és ha bevezetjük a foton fogalmát, ez csak egyfélt jelenthet, amint azt Einstein jól látta első, 1905-ös munkáiban: a valószínűsége annak, hogy egy foton jelen van-e a tér egy pontjában arányos a hozzátartozó fényhullám amplitúdójának négyzetével.

Így a hullámmechanikában állandóan felhasznált  $\psi$  függvény számomra egy teljesen fiktív hullámnak tűnt fel, mely egyszerűen valószínűséget ábrázol és ennek következtében erősen módosul minden ismeretünk, mely a részecske állapotára vonatkozik. A  $\psi$  hullámnak ez a jellege egyre inkább elszáította azt a hullámmechanika további fejlődésétől. Számomra azonban a folytonos hullám mögött mintegy elrejtözve létezett az  $u$  hullám szingularitása, mely a valóságban leírta a részecskét, mint a kiterjedt hullámtér középpontját. Ha egyáltalában az a benyomás keletkezhetett, hogy a  $\psi$  hullám elegendő a részecske viselkedésének leírására, ennek oka a fázisok összeesése volt, mely az én elméletemnek a kulcsát képezte.

Ilyen volt a hullámmechanikának az a bonyolult és furcsa értelmezése, melyet 1927-ben próbáltam kifejtetni. Hamarosan rá kellett jönnöm, hogy ennek az értelmezésnek az igazolása igen nagy matematikai nehézségekbe ütközött. Be kellett bizonyítani, hogy egy összes határfeltételeivel jól meghatározott



hullámmechanikai probléma esetén, ahol a  $\psi$ -típusú megoldást ismerjük, valóban ugyanúgy léteznek az  $u$ -típusú, változó szingularitású megoldások. Számot kellett adni az interferencia-jelenségekről is, pl. a Young-féle résekről, kizárólag a szingularitást tartalmazó  $u$  hullám segítségével, mint egyedüli fizikai realitással, anélkül, hogy hivatkoznánk a fiktívnek tekintett folytonos  $\psi$  hullámokra. Az  $u$  hullámok segítségével értelmezni kellett a részecskéknek a rendszerét a konfigurációs térben, amint azt Schrödinger a hullámmechanikában kifejtette, stb. Én azonban nem éreztem magamat képesnek ezeknek a nehéz matematikai problémáknak a megoldására, melyek mindig a szingularitásra vonatkozó megoldások szorgalmas tanulmányozásával jártak együtt.

Jelenleg azok az új vizsgálatok, melyeket néhány hónap óta folytatok 1927-es gondolataimmal kapcsolatban, arra vezettek, hogy az  $u$  hullám meghatározásának módosítását javaslom. 1927-ben az  $u$  függvényt úgy tekintettem, mint a hullámmechanika  $\psi$  hullámának szingularitással bíró egyenleteinek megoldását. Különböző megfontolások, különösen az általános relativitás elméletével való kapcsolat, amelyről alább lesz szó, arra a gondolatra vezettek, hogy az  $u$  hullám terjedésének igazi egyenlete lehet, hogy nem *lineáris*, mint azok az egyenletek, amelyekkel az Einstein-féle gravitációs elméletben találkozunk, olyan nem lineáris egyenlet, mely lehetővé tenne egy közelítő hullámegyenletet, ha  $u$  értékei elég alacsonyak. Ha ez a szempont helyes, azt is fel lehetne tenni, hogy az  $u$  hullámmal nem jár együtt egy változó szingularitás, a szingularitás szó szoros értelmében, hanem csupán egy igen kis, változó szinguláris tartomány (kétségtől  $10^{-13}$  cm nagyságrendű), amelynek belsejében  $u$  értékei elég nagyok legyenek ahhoz, hogy a lineáris közelítés már ne legyen érvényes ugyanakkor, amikor érvényes az egész térben, ezen a kis tartományon kívül. Sajnos, ez a módosított felfogás nem teszi könnyebbé az adódó matematikai problémák megoldását, mert ha a lineáris egyenletek megoldásainak szingularitásaival gyakran nehéz foglalkozni, a nem lineáris egyenletek megoldásainál ez még nehezebb.

Térjünk vissza 1927-be. Tavasszal Lorentz felkért, hogy készítsek egy beszámolót a hullámmechanikáról az 5. Solvay Kongresszus számára, melyet a következő október hónapban készültek megtartani Bruxelles-ben. Mivel tisztában voltam azokkal a nehézségekkel, melyeket le kellett győznöm, hogy matematikai szigorúság szempontjából többé-kevésbé kielégítő módon adjak számot a kettős megoldásra vonatkozó gondolataimról, elhatároztam, hogy egy olyan egyszerű álláspontot fogok elfoglalni, melynek lehetőségére a *Journal de Physique*-ben megjelent cikkem végén utaltam. Mintahogy akkori gondolataim szerint a részecske mozgását meghatározza a fázis gradiense, mely az  $u$  és  $\psi$  megoldásoknál közös, mindez látszólag úgy történik, mintha a részecskét a folytonos hullám „vezetné”. Ennek megfelelően tehát — úgy gondoltam — a következő álláspontra lehet helyezkedni: a részecske létezése legyen objektív valóság és tegyük fel, hogy mozgásában a  $\psi$  hullám vezeti, követve azt a kép-



letet, mely szerint a „sebesség arányos a fázis gradiensevel.“ A dolgoknak az ilyen módon való ábrázolását a kifejező „vezér hullám elmélete“ („theorie de l'onde pilote“) elnevezéssel jelöltem meg és ilyen alapon építettem fel referátumomat, mely az 5. Solvay kongresszus beszámolóiban\* jelent meg.

Ebben a pillanatban még nem vettem észre, hogy a vitában ezt a vonalat követve erősen meggyengíttem saját pozíciómat. Mert valóban, ha a kettős megoldás elméletét nehéz is matematikailag igazolni, ez mégis alkalmas arra, hogy siker esetén az anyag szerkezetébe, a hullámok és részecskék kettős természetébe mély bepillantást nyújtson, sőt esetleg — mint látni fogjuk — lehetővé teszi a kvantumfelfogás és a relativisztikus felfogás közelítését. A vezérhullám segítségével egyszerűsített elmélet, bár a kettős megoldás elméletének egyik következménye, nem rendelkezik ezekkel az előnyökkel. Míg a  $\psi$  hullámnak teljesen statisztikai és fiktív jellege mindenki által elfogadottnak és feltételezettnek látszik, a vezérhullám elmélete ahhoz az elfogadhatatlan eredményhez vezet, hogy a részecske mozgását egy olyan mennyiség, a folytonos  $\psi$  hullám, határozza meg, melynek semmiféle reális fizikai értelme nincsen és mely annak az ismereteitől függ, aki alkalmazza és akinek azt gyorsan meg is kell változtatnia, mihelyt valamely újabb adat birtokába jut.

Ha azoknak a gondolatoknak, melyeket 1927-ben kifejtettem, egy napon fel kellene hamvaikból éledniök, akkor ez csak a kettős megoldás bonyolult formájában történhetnék és nem a vezérhullám csonka és elfogadhatatlan alakjában.

1927 októberében a Solvay kongresszus előtt a vezérhullámról szóló beszámolóm kevésbé talált meghallgatásra. Pauli komoly ellenvetéseket tett, melyekre sejtettem, hogy mi lenne a lehetséges válasz, anélkül, hogy teljes pontossággal meg tudtam volna fogalmazni.\*\* Schrödinger, miután nem hitt a korpuszkulák létezésében, nem tudta gondolatmenetemet követni. Bohr, Heisenberg, Born, Pauli, Dirac stb. kifejtették azt a teljesen valószínűségi értelmezést, melyet már fentebb a jelenleg legortodoxabb értelmezésnek jelöltem meg. Lorentz, a kongresszus elnöke, nem tudott megfelelő értelmezést adni és újból hevesen erősítette, hogy az elméleti fizikának determinisztikusnak kell maradnia és továbbra is világos fogalmakat kell használnia a tér és idő klasszikus kereteiben. Einstein a valószínűségi értelmezést bírálta és kissé zavarbaejtő ellenvetéseket szögezett vele szembe: megerősített abban a nézetemben, melyet magamévá tettem, anélkül, hogy közben határozottan helyeselte volna próbálkozásomat.

E viták miatt nagyon nyugtalanul tértem vissza Párisba, a téma felett elmélkedve arra a következtetésre jutottam, a fent kifejtett és még egyéb okok miatt is, hogy a vezérhullám elmélete megvédhetetlen. Nem mervén visszatérni

\* Ezek a beszámolók *Elektronok és fotonok* címen jelentek meg. (Gauthier Villars 1928.)

\*\* Lásd: *Elektronok és fotonok* 280. old.



a kettős megoldás elméletéhez, annak matematikai nehézségei miatt, elvesztettem a kedvemet és csatlakoztam Bohr és Heisenberg tisztán valószínűségi értelmezéséhez.\* Huszonöt éve oktatásom alapjaként fogadtam el azt és hirdetem előadásaimban és könyveimben. Kerestem, hogyan lehetne világosan elhatárolni a különböző álláspontokat és a tapasztalat alapján meggyőződhettem róla, hogy ez nem mindig könnyű feladat. Most ismét megkísérlem, hogy ezek rövid összefoglalását adjam.

Bohr és Heisenberg felfogásában nem szerepel egyéb, mint a részecske és a folytonos  $\psi$  hullám, de sem az egyiket, sem a másikat nem lehet klaszikus módon előállítani. Egy részecskének általában nem lehet se helyzetet, se sebességet, sem jól meghatározott pályát tulajdonítani: csupán abban a pillanatban, amikor egy megfigyelést vagy mérést végzünk, lehet megmondani, hogy ez és ez a helyzete vagy ez és ez a sebessége. A részecske tehát, azt lehetne mondani, minden időpillanatban a lehetséges helyzetek vagy mozgási állapotok egész sorával rendelkezik és ezek a különféle lehetőségek aktualizálódhatnak a mérés pillanatában bizonyos valószínűségekkal. Itt játszik közre a kísérő  $\psi$  hullám: ez a részecske lehetőségeinek összességét ábrázolja a megfelelő valószínűségekkal. Így tehát a  $\psi$  hullámnak a térben való kiterjedése a részecske helyzetének indeterminált voltát fejezi ki, mely a hullám által elfoglalt tartománynak valamely pontján olyan valószínűséggel jelenhet meg, mely arányos a hullám amplitudójának négyzetével ebben a pontban. Ugyanez vonatkozik az impulzusokra: a  $\psi$  hullám „spektrális“-an sorbafejthető Fourier integrálok segítségével és a felbontás állítja elő az impulzus mérések összes lehetséges eredményének valószínűségét a Fourier sor megfelelő együtthatójának a négyzete által. Ezután az értelmezést erősen általánosítják, alkalmazva azt minden mérhető mennyiségre; matematikailag az elmélet igen elegáns formát ölt, felhasználva a lineáris analízis minden segédeszközét: a sajátértékek és saját-függvények elméletét, a saját-függvények sorbafejtését, a mátrixokat, a Hilbert teret stb. Majd kimutatják, hogy e formalizmus kikerülhetetlen következményei a „Heisenberg-féle bizonytalansági relációk“, melyek szerint soha sem tudjuk pontosan és egyidejűleg megismerni egy részecske helyzetét és impulzusát, mivel minden megfigyeléssel vagy tapasztalattal, mely növeli tudásunkat a helyzetre vonatkozólag, együttjár mint ellentét, az impulzusra vonatkozó ismeretünk csökkenése és megfordítva.

Bohr és Heisenberg hullámmechanikai értelmezésének számos olyan következménye van, melyek új filozófiai távlatokat nyitnak meg. A részecske a tér és idő keretében többé nem jól meghatározott tárgy; nem egyéb, mint a valószínűség által kormányozott lehetőségek összessége, olyasvalami, amely futólag jelenik meg előttünk egyszer az egyik, egyszer a másik alakban.

Bohr, aki korunk egyik legnagyobb tudósa, aki azonban kissé a jelenkori fizika Rembrandtja is, mivel néha bizonyos előszeretettel árul el a „clair

\* Ezt az értelmezést először úgy látszik, Born vetette fel.



obscure“ iránt, azt mondja a korpuszskulákról, hogy azok „unsharply defined individuals within finite space-time limits.“ \* A hullám még tökéletesebben elveszti régi fizikai értelmét, mint a részecske: csupán a valószínűségek ábrázolója („az előrelátás egy eleme“ — mondja Destouches), melyek attól függnék, milyen ismereteket szerzett alkalmazójuk. A hullám személyes és szubjektív, mint a valószínűségi eloszlások és mint azok, azonnal módosul, ha felhasználója újabb adatokat szerez: ez az, amit Heisenberg úgy nevezett, hogy a „hullámcsomagok redukciója mérés által“, ez a redukció önmagában is elegendő lenne a  $\psi$  hullám nem-fizikai jellegének bizonyítására.

Ezzel egy csapásra eltűnik a jelenségeknek a régi fizika által feltételezett determinizmusa, amellyel összefüggött az a lehetőség, hogy a tér és idő keretén belül a fizikai valóságról világos képet alkossunk. Általában nem lehet bizonyossággal előre látni, hogy milyen jelenségek fognak lejátszódni: a különböző lehetséges jelenségeknek csak a valószínűsége hozzáférhető számításaink számára. Igaz, hogy minden mérés között a valószínűségek szigorúan a hullámegyenlet által megszabott módon alakulnak, de minden új mérés vagy megfigyelés a számunkra szolgáltatott adatok következtében megszakítja a valószínűségeknek ezt a determinisztikus sorát.

Bohr és Heisenberg értelmezése nemcsak, hogy az egész fizikát visszavezeti a valószínűségre, hanem olyan értelmet ad ennek a fogalomnak, mely teljesen újszerű a természettudományban. Míg a klasszikus korszak minden nagy tudósa, Laplace-tól Henri Poincaré-ig mindig hangoztatta, hogy a természeti jelenségek determináltak és a valószínűség fogalmának bevezetése a tudományos elméletekbe tudatlanságunknak vagy annak következménye, hogy képtelenek vagyunk egy túl bonyolult determinizmust alkalmazni, addig a kvantumfizika jelenleg elfogadott értelmezésében a „tisztá valószínűség“-gel van dolgunk, mely nem egy rejtett determinizmusból származik. A klasszikus elméletben, mint a kinetikus gázelméletben is, a valószínűségi törvényeket úgy tekintettük, mint tudatlanságunk eredményét, mivel a teljesen determinált rendezetlen és bonyolult gáz molekulái megszámlálhatatlanok: a molekulák helyzeteinek és sebességeinek ismerete elvben megengedné, hogy pontosan kiszámítsuk a gáz állapotát, a gyakorlatban azonban tudatlanságunk következtében bevezetjük a rejtett paraméterek értékeinek valószínűségét. A hullámmechanika tisztán valószínűségi értelmezése elveti a valószínűségi törvények minden ilyen magyarázatát, amikor azt mondja, hogy e törvények nem a rejtett paraméterek nemismerésének következményei, mint a részecske koordinátája és sebessége, mivel ezek a paraméterek nem léteznek, a részecske nem jelenhet meg jobban meghatározott helyzetben vagy sebességgel, csak futólag a mérés vagy megfigyelés pillanatában. A valószínűség a fizikában ezentúl nem tudatlanságunknak, hanem a tiszta véletlennek kifejezője lesz.

\* Elmosódottan meghatározott egyedek, véges tér-idő határokon belül.



Neumann, mintegy húsz éve, híres levezetésével kimutatta, hogy a hullámmechanika a tapasztalat által igazolt valószínűségi törvényeinek alakja összeegyeztethetetlen rejtett paraméterek létezésével. Ezzel véglegesen elvágta a hidakat: lehetetlenné vált a visszatérés, nem lehetett a részecskét a kvantummechanikai formalizmus rejtett paramétereinek segítségével klasszikus módon értelmezni. Neumann elvont és elegáns bizonyítása nagyon hatásos volt. Sokáig megcáfolhatatlannak hittem. Azonnal ki fogom fejteni, miért kételkedem ma e bizonyítás érvényességében.

Huszonöt éven keresztül szinte majdnem minden fizikus csatlakozott Bohr és Heisenberg tisztán valószínűségi értelmezéséhez. Közben azonban volt néhány igen figyelemreméltó kivétel: az ugyancsak kiváló tudósok, mint Einstein és Schrödinger mindig vonakodtak ezt az értelmezést elfogadni és zavarbaejtő ellenvetéseket tettek. Az 1927-es Solvay kongresszus alkalmából Einstein a következő ellenvetést tette:\* Képzeljünk el egy sík ernyőt, egy réssel, melyre egy korpuszkula esik a  $\psi$  hullámtól kísérve. A  $\psi$  hullám elhajlik a résen és az ernyő mögött felveszi egy divergens gömbhullám alakját. Ha az ernyő mögé egy félgömbalakú filmet helyezünk, fotográfiai felvétellel meg lehetne határozni a részecske helyét a félgömb egy  $P$  pontjában. A hullámmechanika azt tanítja (és ezzel a ponttal mindenki egyetért), hogy annak a valószínűségét, hogy a részecske  $P$ -ben van, a hullám amplitudójának a négyzete adja a  $P$  pontban. Ha a részecske helyzete minden időpontban létezik, lehetséges lenne egy trajektória meghatározása (a rejtett paraméterek segítségével), viszont könnyen megérthető, hogy nem ismerve a részecske pályáját, csupán azt a valószínűséget tudjuk meghatározni, amellyel az a trajektória áthalad az ernyőnek valamely pontján; az a tény, hogy a részecske a fényképező lemezen nyomot hagy a  $P$  pontban, azt mutatja, hogy e részecske trajektóriája áthaladt a  $P$  ponton, és mivel ezt tudjuk, azok a valószínűségek, amelyekkel a trajektória a film egyéb pontjain áthalad, eltűnnek. Ez a magyarázat nagyon világos, de egyáltalában nem tisztán a valószínűségre van alapozva. Eszerint ugyanis, mielőtt a részecske nyomot hagyott volna a fényképező filmen, az ernyő mögötti tartomány minden pontján jelen lehetett, akkora valószínűséggel, amekkora a  $\psi$  hullám amplitudójának a négyzete. Miután a  $P$  pontban létrejött a fotográfiai hatás, a részecske lokalizálódik, azt lehetne mondani, hogy összesűrűsödik a  $P$  pontban és jelenlétének valószínűsége a film egyéb pontjaira nézve *azonnal* nullára esik. Már most, mondta Einstein, ez az értelmezés összeférhetetlen minden térre és időre vonatkozó felfogásunkkal (még a relativisztikus tér-idő felfogással is) és azzal a gondolattal, hogy a fizikai hatások a térben fokozatosan terjednek, véges sebességgel. És nem lenne elég, ha azt mondanánk, hogy a makroszkopikus tapasztalásból leszűrt tér-idő fogalmaink az atomi folyamatok esetében nem kielégítőek: a film méretei ugyanis makroszkopikusak (akár  $1\text{ m}^2$ -es területe is

\* Lásd: *Elektronok és fotonok*.



lehet) és ha itt valóban a tér-idő fogalmak elégtelenségéről lenne szó, akkor ez makroszkopikus folyamatokra is vonatkoznék, ezt pedig igazán nehezen lehetne elfogadni. Ehhez az ellenvetéshez, melyre Einstein — tudomásom szerint — nem adott kielégítő választ, még másokat is lehet hozzáfűzni, melyeket Schrödinger és maga Einstein is felhozott, melyek a kölcsönhatásokra és az azokból következő „correlációs” állapotokra vonatkoztak. Nem tudom itt felsorakoztatni az érveket, csak annyit mondhatok, hogy azok, mint Einstein ellenvetései is 1927-ben, ellentmondó következtetésre vezetnek, különösen azáltal, hogy kétségbevonják a térre és időre vonatkozó régi felfogásunk helyességét még makroszkopikus folyamatokra nézve is. Nyilvánvaló, hogy Bohr megfelelt a kritikusoknak a maga szokott módján, nagyon finom és érdekes megfontolásokkal; ezeket a válaszokat azonban kissé körülveszi az a „clair-obscur”, amiről már az előbb beszéltem és ezért ezek nem tűnhetnek fel teljes egészükben meggyőzőknek.

Igy a helyzet egy negyedszázadon keresztül körülbelül megszilárdult, amikor megjelent Bohm cikke, melyről az elején beszéltem. Ez a cikk nem tartalmaz semmi lényegesen újat, mivel csupán a vezérhullám elméletét újítja fel, melyet a Solvay kongresszuson adtam elő, azt az elméletet, melyben a szingularitással bíró  $u$  hullám helyett, melyet a kettős megoldás elméletében vezettem be, a valószínűségi  $\psi$  hullámot szerepeltettem és mely számomra mindig legyőzhetetlen nehézségekbe látszott ütközni.

Ennek ellenére, azonkívül, hogy felhívta a figyelmet ezekre a kérdésekre, Bohm maga is tett néhány érdekes megjegyzést, különösen azáltal, hogy a mérés folyamatát a vezérhullám szempontjából elemezte és ez lehetővé tette, hogy Pauli 1927-es ellenvetéseit az én gondolataimmal szemben visszautasítsa. Amióta megismertem Bohm tanulmányát és Vigier gondolatait, melyekről azonnal beszélni fogok, újra kezdtem ezek tárgyával foglalkozni két cikkemben, melyek a *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences* 1951-es januári számában jelentek meg. Az egyik pont, mely figyelmemet magára vonta, a következő: Neumann bizonyítása szerint a hullámmechanikában a valószínűségek eloszlásának minden olyan értelmezése megengedhetetlen, mely a rejtett paraméterek kauzális elméletén alapszik; mármost a kettős megoldás és a vezérhullám elméletei, ha nem is tekinthetők bebizonyítottaknak, *léteznek* és fel lehet tenni a kérdést, hogyan egyeztethető létezésük össze Neumann tételével. Ez a megjegyzés arra készítetett, hogy újból megvizsgáljam e tételnek a bizonyítását és akkor észrevettem, hogy ez a bizonyítás kizárólag a következő posztulátumon alapszik: a hullámmechanika szerint feltételezett valószínűségi eloszlások mind fizikailag léteznek, *még mielőtt elvégezték volna azt a kísérletet, melynek alapján ezen eloszlások valamelyike szerephez jut*. A valószínűségi eloszlások tehát, melyek a  $\psi$  hullámra vonatkozó ismereteinkből vezethetők le és a hely- és impulzus-koordinátára vonatkoznak, már léteznek, mielőtt megtörténtek volna azok a mérések, melyek lehetővé tennék a hely vagy az impulzus pontos meghatározását. Pedig ennek éppen az ellenkezőjét lehet



feltenni (és ez teljes egészében összhangban van azzal a lényeges szereppel, melyet ma minden kvantumfizikus a mérési aktusnak tulajdonít), mégpedig azt, hogy ezek a valószínűségi eloszlások, vagy legalább is ezek közül néhány, éppen a mérés végrehajtása által jön létre és nem létezhet, csak ha a mérés már befejeződött, de amelynek eredményét még nem ismerjük. A kettős megoldás és a vezér-hullám elméleteiben, melyek ezen a ponton sokkal határozottabbak, feltesszük, hogy a helyzetre vonatkozó valószínűségi eloszlás, melyet a folytonos  $\psi$  hullám amplitudójának a négyzete határoz meg, minden mérés előtt már létezik, de minden egyéb valószínűségi eloszlás (például az impulzusra vonatkozó) csak a mérés által jön létre; az a követelmény tehát, mely Neumann bizonyításának alapját képezi, nem tartható fenn és így elesik a bizonyítás konklúziója is. A tisztán valószínűségi értelmezés szerint minden valószínűségi eloszlás abszolút egyenértékű és ezért Neumann ezt az egyenértékűséget tette meg kiindulópontnak, evvel azonban egyszerűen azt mutatta meg, hogy ha kiindulunk a tisztán valószínűségi elmélet alapfogalmaiból, akkor ettől az értelmezéstől többé megszabadulni nem lehet. Itt tehát egy *circulus vitiosus*-féle áll előttünk és Neumann bizonyításának úgy látszik nincs többé meg az a jelentősége, melyet az utóbbi években magam is tulajdonítottam neki.

Bohm próbálkozásának hatása alatt Jean Pierre Vigier-nek, aki az Henri Poincaré intézetben dolgozik, az az érdekes ötlete támadt, hogy kapcsolatot keressen a kettős megoldás elmélete és Einsteinnek\* egy tétele között (mely szintén 1927-ből való, de teljesen független az én kutatásaimtól, mert én csupán a kvantummechanikában dolgoztam és nem foglalkoztam az általános relativitás elméletével, míg Einstein az általános relativitás-elméletre koncentrált magát és nem foglalkozott a kvantummechanikával). Hogy megérthessük, mennyire érdekes ez a közeledés, tudni kell, hogy az elméleti fizikusok jelenleg két olyan irányzat között oszlanak meg, melyek összeegyeztethetetlennek látszanak. Az egyik oldalon Einstein és tanítványai alkotnak egy kis csoportot, akik relativisztikus vizsgálatokat folytatnak, az általános relativitás elméletét igyekeznek továbbfejleszteni. A másik oldalon az elméleti fizikusok nagy többségét az atomfizikai problémák érdeklik és a kvantummechanika haladását igyekeznek elősegíteni, anélkül, hogy bármiféleképpen törődnének az általános relativitás elméletével. A hullámmechanikában az igaz, hogy számbavették a speciális relativitáselmélet fogalmait és megpróbálták azokhoz kapcsolódni: Dirac elektronspinre vonatkozó elméletében és újabban Tomonaga, Schwinger, Feynman és Dyson szép elméleteikben felhasználták a relativisztikus kovarianciát. De mindig csak a speciális relativitáselmületről van szó, Már most azt szoktuk mondani, hogy a speciális relativitás önmagában nem elegendő, hanem azt általánosítani kell, amint azt Einstein tette 1916-ban.

\* Meg kell jegyeznünk, hogy egészen analóg eredményt kapott 1925-ben M. Georges Darmais (I. G. Darmais, *Les équations de la Gravitation einsteinnienne*, *Mémorial des Sciences mathématiques*, Gauthier—Villars, 1927).



Az a paradox helyzet áll tehát elő, hogy korunk fizikájának két nagy elmélete, az általános relativitás elmélete és a kvantumelmélet között ma semmi kapcsolat nincs és egymásról kölcsönösen nem vesznek tudomást. Jó lenne, ha egyszer el lehetne jutni egy szintézishez.

Einstein, miután nagy vonásokban megalkotta az általános relativitás elméletét, azzal foglalkozott, miképpen lehetne az anyag atomos szerkezetét a gravitációs tér szingularitásainak segítségével előállítani. Másrészt foglalkozott még a következő ponttal is: az általános relativitás elméletében feltesszük, hogy egy test mozgását a tér-idő sokaságban annak egy geodétikus vonala írja le. Ez a feltevés lehetővé tette Einstein számára, hogy értelmezze a bolygók mozgását a Nap körül és azonkívül megmagyarázza a Merkúr perihéliumának szekuláris változásait. Ha azonban az anyag elemi részeit a gravitációs tér szingularitásainak létezésével akarjuk meghatározni, lehetséges kellene legyen annak bizonyítása, hogy *csupán a gravitációs tér egyenleteiből kiindulva*, a szingularitások mozgása a tér-idő geodétikus vonalai mentén történik, anélkül, hogy ezt az eredményt mint független előfeltételt kellene bevezetni. Ez a kérdés sokáig foglalkoztatta Einsteint, akinek végül 1927-ben sikerült Grommerrel\* együttműködésben a kitűzött tételt igazolnia. Ezt a bizonyítást azután megismételte és különféle módokon kiterjesztette maga Einstein, valamint munkatársai: Infeld\*\* és Hoffmann. Kétségtelen, hogy Einstein tételének bizonyítása mutat némi analógiát az enyémmel, melyet 1927-ben végeztem, annak igazolására, hogy egy részecske sebességének az irányát mindig az  $u$  hullám fázisának a gradiense adja meg, amelynek szingularitását alkotja a részecske. Vigier nagy lelkesedéssel próbálja ezt az analógiát pontosabbá tenni azért, hogy megkísérli  $u$  hullámfüggvényeit bevezetni a tér-idő sokaság meghatározásába. Bár e próbálkozások nem jártak még teljes eredménnyel, bizonyos, hogy a szempont, melyhez fűződnek, rendkívül érdekes, mert elvezetnek az általános relativitáselmélet és a hullámmechanika gondolatainak egyesítéséhez. Ha az anyagi részecskéket (és ugyanúgy a fotonokat is) mint a tér-idő sokaság szingularitásait állítjuk elő, melyeket egy a részecskéből kiinduló hullámmező vesz körül, és amelynek definíciójában szerepel a Planck-féle állandó, egyesíteni lehetne Einsteinnek a részecskékre vonatkozó felfogását az én elméletemmel, mely a kettős megoldásra vonatkozik. A jövő fogja megmutatni, hogy a relativitáselméletnek és a kvantummechanikának ez a nagyszabású szintézise valóban lehetséges-e.

Egy dolog bizonyosnak látszik előttem, az, hogy egy ilyen szintézisben meg kell majd találni és igazolni kell majd tudni a hullámmechanika jelenlegi formájának minden eredményét, számítási módját, beleértve azt is, hogy általában lehetetlen előre látni egy mikrofizikai mérés eredményét, a Heisenberg-féle bizonytalansági relációkat, az atomi rendszerek kvantált voltát stb. Dehát akkor, mondhatja valaki, minek módosítani a jelenlegi elméletet, ha evvel

\* Sitz. Preuss. Akad. Wiss. I. kötet 1927.

\*\* Rev. Mod. Phys. 24. 1949. 408. lap.



számot tudunk adni minden megfigyelhető jelenségről, minek bevezetni mindezeket a felesleges bonyodalmakat, mint a kettős megoldás, szinguláris megoldás stb., kitéve magunkat annak, hogy zsákutcába jutunk? Erre elsősorban azt lehetne felelni, hogy a világos, karteziánusi fogalmakhoz való visszatérés, melyek tiszteletben tartják a tér és idő keretének érvényességét, bizonyára soknak a szellemét fogja meglepődéssel eltölteni és nemcsak azt fogja lehetővé tenni, hogy Einstein és Schrödinger nyugtalanító ellenvetéseit megszüntessük, hanem hogy kikerüljük a jelenlegi értelmezés néhány furcsa következtetését is. Mert valóban, ez az elmélet, amikor a kvantumfolyamatokat kizárólag a folytonos  $\psi$  hullámfüggvénnyel próbálja leírni, melynek statisztikai jellege bizonyos, logikusan valami „szubjektívizmus“-félébe torkollik, mely filozófiai értelemben idealizmusnak tűnik fel, mivel arra irányul, hogy tagadja a megfigyelőtől függetlenül létező fizikai valóságot. Mármint a fizikus — amint azt Meyerson nemrégiben erősen hangsúlyozta — ösztönösen „realista“ marad és erre jó okai vannak: a szubjektivista értelmezések mindig nagyon kellemetlen benyomást keltettek benne és azt hiszem, hogy végül is örülni fog, ha megszabadulhat tőlük.

Azt is lehet azonban Bohmmal együtt gondolni, hogy ha a jelenlegi elmélet kielégítő is az atomi folyamatok leírására ( $10^{-8}$  cm —  $10^{-11}$  cm), lehet, hogy nem ez lesz az eset magfolyamatoknál ( $10^{-13}$  cm), mert a különböző részecskék egyes zónái ekkor összeeshetnek és ezeket nem lehet majd többé izoláltaknak tekinteni. Be kell bizony vallani, hogy jelen pillanatban a magjelenségek elmélete és különösen azoké az erőké, melyek fenntartják a mag stabilitását, igen kevésbé kielégítő. Sőt, mi több, az anyagi részecskék elméletének hiányosságai egyre bántóbbakká válnak azáltal, hogy majdnem minden hónapban felfedeznek egy újfajta mezont. Úgy látszik, a fizikában sürgősen szükség lenne rá, hogy a részecskék szerkezetét definiálni tudjuk és főképpen arra, hogy bevezessük az „elektron-sugár“ fogalmát a régi Lorentz-féle elméletnek megfelelően. Már most ebben erősen akadályozza a fizikusokat az, hogy a részecskék leírására kizárólag a statisztikus  $\psi$  hullámot használják, mely lehetetlenné teszi, hogy a részecskéknek bármiféle szerkezeti képét alkalmazzuk. Hinni lehet, hogy ha megváltoztatjuk nézeteinket a tér-idő elképzeléséhez való visszatérésre vonatkozólag, a helyzet meg fog javulni; nyilvánvaló, hogy ez csupán remény, kitöltetlen csekk — mondta Pauli — de ezt a lehetőséget, úgy gondoljuk, nem kell *a priori* tökéletesen kizártnak tartani és ki kell kerülni azt az igen nagy veszélyt, mely abban áll, hogy a kvantumfizika tisztán valószínűségi értelmezésébe vetett túl nagy hit azzal fog végződni, hogy a fizika terméketlenné válik.

A kérdés, mely végül felmerül, amint azt Einstein gyakran hangsúlyozta, az, hogy ha a jelenlegi értelmezés, mely kizárólag a statisztikus jellegű  $\psi$  függvény alkalmazásán alapszik, „teljes“ leírását adja a valóságnak, akkor fel kell tételnie az indeterminizmust és annak lehetetlenségét, hogy az atomi folyamatok realitását térben és időben pontosan ábrázoljuk, vagy ha ellenkezőleg,



ez az értelmezés „nem teljes“, akkor mögötte, mint a klasszikus fizika régi statisztikus elméletei mögött egy tökéletesen determinált valóság rejtőzik, mely térben és időben olyan változókkal írható le, melyek előttünk rejtve maradnak, azaz kísérleteinkkel nem tudjuk őket meghatározni. Ha ez a második hipotézis termékenynek bizonyulna, szerintem egy többé-kevésbé megjavított kettős megoldás elméletének alakjában történhetne, mely kétségkívül kapcsolatban lenne az általános relativitás elméletével, mely azt világosabbá tenné. Tudatában vagyok azonban annak (és erről az egész kérdésnek újabb vizsgálata még jobban meggyőzött), hogy milyen nagy, sőt esetleg áthághatatlan nehézségekbe ütközik egy ilyen próbálkozás és milyen nehéz matematikai bizonyítások lesznek szükségesek az elmélet megszilárdításához. Ha a vállalkozás kivihetetlennek bizonyulna, vissza kellene térni a tisztán valószínűségi értelmezéshez, de jelen pillanatban a kérdés újabb megvizsgálása nem látszik előttem feleslegesnek.

Miután első próbálkozásaimat abbahagytam, huszonöt esztendőn át hirdetem Bohr és Heisenberg nézeteit, tehát kétségkívül lesznek néhányan, akik talán állhatatlansággal fognak vádolni, látva azt, hogy újabb kételyek támadtak bennem e tárgygal kapcsolatban és hogy felteszem magamnak a kérdést, hogy mindezek után nem volt-e mégis az én első orientációm a helyes. Erre, ha tréfálni akarnék, azt felelhetném Voltair-rel: „Csak az ostoba ember nem változik.“ De sokkal komolyabb választ is lehet adni. A természettudományok története azt mutatja, hogy a tudomány haladását állandóan akadályozta olyan nézetek zsarnoki befolyása, melyeket az emberek végül is dogmaként kezeltek. Ezért szükséges, hogy időnkint nagyon mélyrehatóan felülvizsgáljuk azokat az alapelveket, melyeket vita nélkül alkalmazunk. A hullámmechanika tisztán valószínűségi értelmezése kétségkívül igen nagy szolgálatot tett egy negyedszázadon át a fizikusoknak, mert nem engedi, hogy beletévedjenek a túlságosan bonyolult és nehezen megoldható problémákba, mint amilyeneket a kettős megoldás elmélete is felvet, és lehetővé teszi számukra, hogy határozottan haladjanak előre a számos gyümölcsöző alkalmazás irányában. Ma azonban annak a hullámmechanikának a magyarázó ereje, melyet eddig tanítottak, nagyrészt kimerítettnak látszik. Ezt mindenki elismeri és maguk, a valószínűségi elmélet hívei is megkísérlik — úgy látszik, nem nagy sikerrel — új fogalmak bevezetését, melyek egyre elvontabbak és egyre távolabb esnek a klasszikus fizika elképzeléseitől, mint az  $S$  mátrix, a minimális hossz, a nemlokalizált mező stb. Anélkül, hogy tagadná e kísérletek érdekességét, az ember azt kérdezheti, nem kellene-e inkább a térben és időben világos fogalmakhoz való visszatérés irányába haladni. Mindenesetre, feltétlenül hasznos újrafelvetni a hullámmechanika értelmezésének rendkívül nehéz problémáját, hogy lássuk, valóban csak a ma orthodoxnak tekinthető értelmezést lehet-e alkalmazni.



# A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## ANYAGON ÁTHALADÓ ELEKTROMOSAN TÖLTÖTT RÉSZECSKÉK SEBESSÉGSÖKKENÉSÉNEK ELMÉLETE\*

N. BOHR, Kopenhaga

A Manchester-i Egyetem Fizikai Intézete, 1912 augusztus

### *Előszó Bohr cikkéhez*

Bohrnak itt közölt cikke az első abban a sorozatban, amelynek keretében külföldi szerzők fontosabb eredeti dolgozatait magyar fordításban fogjuk közölni. Maga a cikk olyan világos és egyszerű, hogy minden kommentárt feleslegessé tesz. Itt csupán egyetlen körülményre kívánjuk az olvasó figyelmét felhívni, amely ugyan a cikkben világosan ki van fejtve, de amelynek jelentősége csak később vált teljes egészében világossá.

Bohrnak cikke megírásához a Rutherford-féle szórás kísérletek adtak alkalmat, amely kísérletekből már Rutherford arra következtetett, hogy az atom viszonylag kis magból áll, amelyet az elektronhéj vesz körül. Bohr itt az  $\alpha$ -részecskék szóródásának és energia-vesztésének olyan javított elméletét adja, amely a Rutherford-féle atommodellt veszi alapul. A gondolatmenet tisztán klasszikus, minthogy lényegében arra a feltevésre épül, hogy egyrészt  $\alpha$ -részecskék és atomelektronok, másrészt  $\alpha$ -részecskék és atommag között a klasszikus Coulomb-féle kölcsönhatás áll fenn. Az a módosítás viszont, amelyet, mint Bohr kimutatja, a régebbi ilyenfajta számításoknál alkalmazni kell, éppen azon a feltevésen alapszik, hogy az elektronok az atomban harmonikusan vannak kötve. Ez az utóbbi feltevés azonban teljes ellentmondásban áll a Coulomb-féle kölcsönhatás és a kis mag egyidejű feltételezésével. Ily módon tehát Bohr tanulmánya már a kvantumelmélet csiráit tartalmazza és mindenestre megmutatja, hogy a tisztán klasszikus tárgyalási mód nem vihető keresztül.

*Jánossy Lajos*

Ha katódsugarak vagy  $\alpha$ - és  $\beta$ -sugarak anyagon haladnak át, akkor sebességük csökken. A jelenség első elmélete J. J. Thomsontól származik [1]. E szerző számításaiban feltételezte, hogy a katód- és  $\beta$ -sugarak sebességüket az anyag atomjainak elektronjaival való ütközés következtében veszítik el. Whiddington [2] nemrég kimutatta, hogy a törvénynek a számítás szerinti alakja, amely összekapcsolja a részecskék sebességét és az anyagban megtett

\* Megjelent: *Phil. Mag.* S. 6, Vol. 25. No. 145. Jan. 1913.



utat, jó egyezésben van a kísérlettel. Némileg különböző elgondolásokat használt J. J. Thomson az  $\alpha$ -sugarak abszorpciójánál. Ugyanis, számításba véve ezek feltételezett nagyobb dimenzióját, feltette, hogy ezek nem az egyes elektronokkal, hanem az anyag egésznek tekintett atomjaival ütközve veszítik el sebességüket.

Rutherfordnak az  $\alpha$ -sugarak anyagon való szóródásáról alkotott elméletével [3] összhangban feltételezhető, hogy az anyag atomjait egy elektronhalmaz alkotja, amelyet egy mag vonzóerői tartanak össze. Feltehető továbbá erről a magról, amelynek az elektronok negatív töltésének összegével egyenlő pozitív töltése van, hogy ebben van az atom tömegének lényeges része és hogy dimenziói elhanyagolhatóan kicsik az atom dimenzióihoz képest. Ezzel az elmélettel összhangban az  $\alpha$ -részecske egyszerűen a hélium atom magja. Úgy látjuk, hogy egy ilyen elgondolás mellett nincsen ok lényeges különbséget tenni abban, hogy  $\alpha$ - vagy  $\beta$ -részecske ütközik-e az atommal — eltekintve természetesen a töltésük és tömegük különbségéből eredő különbségektől.

C. G. Darwin közölt nemrég egy jól kidolgozott elméletet az  $\alpha$ -sugarak abszorpciójára és szóródására vonatkozólag, amely Rutherford atomszerkezetről való elgondolásain alapult [4]. E szerző elméletében az  $\alpha$ -részek egyszerűen áthatolnak az atomon és a benne levő egyes elektronokra hatnak a távolság négyzetével fordítva arányos erővel [5]. Néhány további egyszerű feltevessel az elektronok eloszlásáról az atomban és a rájuk ható erők hatásáról, Darwin egyaránt jó eredményeket kapott mind a sugarak szóródására, mind abszorpciójára, amelyek közelítőleg egyeznek a kísérlettel.

A fentebbi elméletek azonban felhasználnak néhány olyan speciális feltevést, amelyek szerintem elvi jellegű ellenvetésre adnak alkalmat. Én ebben a dolgozatban megkísérlem a problémát kissé más módon tárgyalni. A szóban forgó elméletek felteszik, hogy a mozgó elektromosan töltött részecske az anyagon keresztülhaladva úgy veszít sebességéből, hogy kinetikus energiát ad át azon atomok elektronjainak, amelyekkel ütközik. Ha feltesszük, hogy az elektronokat az atomban helyükön vagy pályájukon tartó erők elhanyagolhatók az elektronok és részecskék közti nagyon rövid ütközés alatt, nagyon egyszerűen kiszámíthatjuk az elektronok pályáját az ütközések alatt és következőképpen a nekik átadott energiát és a részecske sebességvesztését. Azonban, ha integráljuk a teljes energiavesztést, amely az anyag összes elektronjainak tulajdonítható, ezen az úton végtelen nagy értéket kapunk az abszorpcióra. J. J. Thomson fentebb említett elméletében a katódsugarak sebességcsökkenéséről úgy kerül el ezt a nehézséget, hogy bevezet, mint egy effektív határt az elektronoknak a részecskék sebességére való hatásában, egy távolságot, amely nagyságban összehasonlítható az egyes elektronok atombeli távolságával. Ezt a határt abból a meggondolásból választja, hogy ennél nagyobb távolságokban a különböző elektronok hatása a mozgó részecskére kölcsönösen zavarja egymást. A különböző elektronok szimultán hatása a mozgó részecs-



kékre erősen befolyásolja a kérdéses távolságokban a részecskék eltérítését, amint azt látni fogjuk. Ezért az említett határ megmarad a sugarak szóródásának számításában. Azonban a határ nem marad meg a részecskék sebességcsökkenésének számításában, ugyanis a nagy sebességet figyelembevéve, a részecskék mozgását nagyon kis mértékben befolyásolja az olyan ütközés, amelynél az elektronoknak a részecske pályájától való távolsága nagyságrendben megegyezik az elektronok atombeli távolságával. Egy részecske által egy elektronra gyakorolt erők és következőképpen az ütközéskor átvitt energia tehát nagyon közel független a többi elektronnak a részecskére gyakorolt szimultán hatásától.

Darwin az  $\alpha$ -sugarak abszorpciójáról szóló elméletében más úton halad. A nehézséget azzal a feltevessel kerüli el, hogy az atom részéről az elektronra ható erők elhanyagolhatók az elektron és az  $\alpha$ -részecske közti nagyon rövid és nagyon erős ütközés alatt, vagyis amikor a részecske áthalad azon az atomon, amelyhez az elektron tartozik. További feltevése, hogy az  $\alpha$ -rész sebessége nem változik, ha a részecske útja közben nem lép be az atomba. Ezeket a feltevéseket használva és az elméletet a kísérletekkel összehasonlítva Darwin az atom átmérőjére olyan értéket talál, amely csökken az atomsúly növekedésekor és könnyű elemeknél sokszor nagyobb, a nehéz elemeknél sokszor kisebb, mint az általánosan elfogadott érték. Szerintem azonban nem indokolt, hogy az atom felületét vegyük küszöbnek az atomban levő elektronoknak a részecskékre való hatása szempontjából. Egy atomon kívül az elektronok és a centrális pozitív töltés valóban nagyon közel semlegesítik egymást, de a részecskék sebességcsökkenése csupán az elektronok ütközés alatti mozgásától függ, és nem a részecske által az egész atomra gyakorolt teljes erőtlől. Ez az utóbbi erő csak a részecskék szórását hozza létre.

Ellenben kaphatunk egy természetes küszöböt az elektronoknak a mozgó részecskék sebességére való hatására nézve, ha számításba vesszük azokat az erőket, amelyekkel az elektronok az atomban helyükhöz vannak kötve. Ezeknek az erőknek a befolyása alatt az elektronok valamilyen fajta rezgőmozgást végeznek, ha egy külső impulzus állapotukat megzavarja. Közvetlenül beláthatjuk, hogy a kérdéses erők lényegileg megváltoztatják az elektronok mozgását az ütközés alatt és következőképpen a részecske energiavesztését, ha az elektron rezgésének ideje nagyságrendben egyezik az ütközés idejével, vagyis azzal az idővel, amely alatt a részecske olyan nagyságrendű távolságot tesz meg, mint a pályája és az elektron közti legrövidebb távolság [6]. Továbbá beláthatjuk, hogy az elektronok hatása a részecske sebességére nagyon gyorsan csökken az elektron és a részecske távolságának növekedésével, ha ez a távolság oly nagy, hogy az ütközési idő nagy a rezgés idejéhez viszonyítva. Az így kapott effektív küszöb az elektronoknak a mozgó részecske sebességére való hatása tekintetében és következőképpen a sugarak abszorpciója, csupán az elektronok frekvenciájától és a részecskék sebességétől függ. Ugyanazon



sebességű részecskéknél is nagyon különböző lehet ez a küszöb az atomon belüli különböző elektronok esetében, megfelelően ezek különböző frekvenciájának. A kérdéses küszöb, legalábbis néhány elektron esetében, sokkal kisebb a nagy atomsúlyú elemeknél (amely elemeknél igen nagy frekvenciájú rezgéseket figyeltek meg), mint az alacsony atomsúlyú elemek elektronjainál. Úgy látszik, és ezt ki is mutatjuk, hogy ez a körülmény ad számot az ilyen elemek viszonylag kisebb abszorpciójáról ugyanazon súly/cm<sup>2</sup> vastag abszorbeáló anyagok esetén.

Látjuk majd, hogy az anyagon áthaladó elektromosan töltött részecskék sebességsökkenésének elmélete ebben a formájában nagyon hasonlít a diszperzió rendes elektromágneses elméletéhez; a különböző hullámhosszak különböző rezgési időit, amelyek a diszperzió elméletben szerepelnek, itt a különböző sebességű és az elektronoktól különböző távolságban levő részecskék különböző ütközési idői helyettesítik. Valóban, ki fogjuk mutatni, hogy az atomokban levő elektronok számának és frekvenciájának ismerete, amelyet a diszperzió elméletből veszünk, elegendő ahhoz, hogy kiszámítsuk az  $\alpha$ -sugarak abszorpciójának értékét a könnyebb elemekre. Ezek az értékek nagyon jól egyeznek a megfigyelt értékekkel. Mivel az elektronok hatásának frekvenciájuk növekedése miatt bekövetkező csökkenése sokkal gyorsabb a diszperziónál, mint a mozgó részek sebességvesztésénél, lehetségesnek látszik, hogy az utóbbi több ismeretet nyújt az atomban levő magasabb frekvenciákról és ezáltal valamivel többet mond az atom belső szerkezetéről.

\* \* \*

Az elektronok és részecskék közti ütközést vizsgálva először elhanyagoljuk az atomoktól eredő erőt. Legyen  $E$  és  $M$  a részecske töltése és tömege,  $e$  és  $m$  a megfelelő mennyiségek az elektronnál. Tegyük fel továbbá, hogy az elektron nyugalomban van, a részecske sebessége az ütközés előtt  $V$ , az elektron távolsága a részecske pályájától az ütközés előtt  $p$ . Ekkor a pályaszámítás eredménye [7]

$$\sin^2 \vartheta = \frac{1}{1 + \frac{p^2 V^4}{e^2 E^2} \left( \frac{mM}{M+m} \right)^2},$$

ahol  $2\vartheta$  az a szög, amellyel a relatív mozgás iránya az ütközés miatt megváltozik. Rövidség kedvéért vezessük be a következő jelölést:

$$\lambda = \frac{eE(M+m)}{V^2 m M}.$$

Az elektron ütközés utáni sebessége  $\frac{\pi}{2} - \vartheta$  szöget zár be a részecske ütközés előtti pályájával, értéke

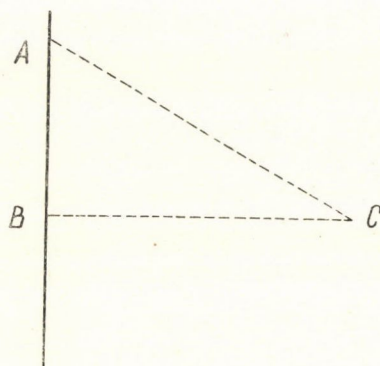
$$v = V \frac{M}{M+m} 2 \sin \vartheta$$

lesz. Következésképpen az elektronnak az ütközés alatt átadott energia

$$Q_0 = \frac{2mM^2V^2}{(m+M)^2} \sin^2 \vartheta. \quad (1)$$

Továbbá könnyen beláthatjuk, hogy az elektron elmozdulása a részecske pályájára merőleges irányban, amikor az elektron és a részecske legközelebb van egymáshoz  $\frac{eE}{mV^2} \cos \vartheta$ . Látjuk, hogy  $\vartheta$  nagyon kicsi, és az elektron sebessége az ütközés után nagyon közel merőleges a részecske pályájára, ha  $p$  nagy  $\lambda$ -hoz viszonyítva; ebben az esetben az elektron elmozdulása az ütközés alatt nagyon kicsi lesz  $p$ -hez viszonyítva.

Most térjünk rá az elektronokat az atomokhoz kötő erők hatásának tárgyalására. Egyelőre feltesszük, hogy az elektron frekvenciája olyan kicsi, hogy rezgésideje igen nagy az ütközés idejével összehasonlítva. Olyan ütközések ezek, amelyekben  $p$   $\lambda$ -val nagyságrendben megegyezik. Ez valójában csak a legkönnyebb elemekre igaz, amint később látni fogjuk. Ebben az esetben a kérdéses erők hatását csak olyan ütközésekben kell vizsgálni, amelyekben  $p$  nagy  $\lambda$ -hoz képest. Ez nagyon egyszerűsíti a számítást, mert ekkor feltehetjük, hogy az ütközés alatt az elmozdulás elhanyagolhatóan kicsi  $p$ -hez viszonyítva. A következő számításokban külön tekintjük az elektronnak a részecske pályájával párhuzamos és arra merőleges mozgását. Az elektronnra az ütközés alatt átvitt teljes energia a kétféle mozgásnak megfelelő energia összege.



1. ábra

Az 1. ábrában az  $AB$  vonal jelzi a részecske pályáját, amely a most vizsgált ütközésben (vagyis ha  $p$  nagy  $\lambda$ -hoz képest) nagyon közel egyenes. Továbbá  $A$  a részecske helyzete  $t$  időben,  $C$  az elektron közepes helyzete.  $BC$  merőleges  $AB$ -re. A fenti jelölés szerint  $\overline{BC} = p$ ; és feltéve, hogy a részecske a  $B$  pontban a  $0$  időben van:  $\overline{AB} = V \cdot t$ . Az elektronnra a  $CB$  irányban ható erő:

$$F_1 = eE \frac{\overline{BC}}{\overline{AC}^3} = \frac{eEp}{(V^2t^2 + p^2)^{\frac{3}{2}}} = m \cdot \Phi(t).$$



Az elektronnak a részecske pályájára merőleges irányban való mozgására a mozgásegyenlet:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + n^2x = \Phi(t),$$

ahol  $n$  a kérdéses erőnek megfelelő frekvencia. Az egyenlet kezdőfeltételei:

$$x=0 \text{ és } \frac{dx}{dt}=0, \text{ ha } t=-\infty. \text{ Ekkor a megoldás [8]}$$

$$x = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^t \sin n(t-z) \cdot \Phi(z) dz; \quad \frac{dx}{dt} = \int_{-\infty}^t \cos n(t-z) \cdot \Phi(z) dz.$$

A fenti kifejezésben feltettük, hogy az elektron a részecskével való ütközés előtt nyugalomban volt; ha feltesszük, hogy az elektronok az ütközés előtt mozgásban vannak az atomokban (azonban pályájuk dimenziója a fenti számítások érvényessége miatt kicsi kell legyen  $p$ -hez viszonyítva; e feltétel teljesülésére nézve lásd később a 200. oldalt) annak hatása csak néhány tag bevezetése lesz  $x$  és  $\frac{dx}{dt}$  kifejezésében. Ezek ismét eltűnnek az átvitt energia középértékének kifejezésében.

Az elektron  $t$  időben vett kinetikus energiájának és az atom többi részétől való elmozdulásból eredő potenciális energiájának összege:

$$\frac{m}{2} \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{mn^2}{2} x^2 = \frac{m}{2} \left[ \int_{-\infty}^t \cos nz \cdot \Phi(z) dz \right]^2 + \frac{m}{2} \left[ \int_{-\infty}^t \sin nz \cdot \Phi(z) dz \right]^2.$$

Az ütközéskor az elektrorra átvitt energia (ez a részecske pályájára való merőleges mozgásból ered), figyelembevée, hogy ebben az esetben  $\Phi(z)$  páros függvénye  $z$ -nek

$$Q_1 = \frac{m}{2} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \cos nz \cdot \Phi(z) dz \right]^2,$$

és behelyettesítve  $\Phi(z)$ -t

$$Q_1 = \frac{1}{2} \frac{e^2}{m} E^2 p^2 \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos nz}{(V^2 z^2 + p^2)^{3/2}} dz \right]^2,$$

$$Q_1 = \frac{2e^2 E^2}{m V^2 p^2} \cdot f^2 \left( \frac{np}{V} \right),$$

ahol

$$f(x) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos xz}{(z^2 + 1)^{3/2}} dz$$

minden  $x$  értékre a következő konvergens sorral állítható elő:

$$f(x) = 1 - \frac{1}{1.1.2} \frac{3}{1.2} \left(\frac{x}{2}\right)^4 - \frac{1}{1.2.1.2.3} \left(\frac{3}{1.2} + \frac{5}{2.3}\right) \left(\frac{x}{2}\right)^6 \dots$$

$$- \frac{1}{(n-1)! n!} \left(\frac{3}{1.2} + \frac{5}{2.3} + \dots + \frac{2n-1}{(n-1)n}\right) \left(\frac{x}{2}\right)^{2n} \dots$$

$$+ \left(2\gamma + 2 \log \frac{x}{2} - 1\right) \left(\left(\frac{x}{2}\right)^2 + \frac{1}{1.1.2} \left(\frac{x}{2}\right)^4 + \frac{1}{1.2.1.2.3} \left(\frac{x}{2}\right)^6 \dots\right.$$

$$\left. + \frac{1}{(n-1)! n!} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n} \dots\right),$$

$\gamma$  az Euler-konstans,  $\gamma = 0,5772$ .

Ha  $x$  nagy,  $f(x)$  megközelíthető a következő aszimptotikus sorral

$$f(x) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot e^{-x} \sqrt{x} \left(1 + \frac{1.3}{8x} - \frac{1.3.5}{1.2} \left(\frac{1}{8x}\right)^2 + \frac{1.3.1.3.5}{1.2.3} \left(\frac{1}{8x}\right)^3 \dots\right.$$

$$\left. (-1)^{n+1} \frac{1.3.5 \dots (2n-3).1.3 \dots (2n-1)}{n! (8x)^n} \dots\right).$$

Az elektronra a részecske pályájával párhuzamosan ható erő (lásd 1. ábra)

$$F_2 = eE \frac{\overline{AB}}{AC^3} = \frac{eEVt}{(V^2 t^2 + p^2)^{3/2}} = m \cdot \psi(t).$$

Az elektronra az ütközés alatt átvitt energiát ugyanúgy kapjuk, mint fent ( $\psi(t)$   $t$ -nek páratlan függvénye)

$$Q_2 = \frac{m}{2} \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \sin nz \cdot \psi(z) dz \right]^2,$$

és behelyettesítve  $\psi(z)$ -t

$$Q_2 = \frac{1}{2} \frac{e^2}{m} E^2 V^2 \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{z \sin nz}{(V^2 z^2 + p^2)^{3/2}} dz \right]^2,$$

$$Q_2 = \frac{2e^2 E^2}{m V^2 p^2} \cdot g^2 \left(\frac{np}{V}\right),$$

ahol

$$g(x) = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{z \sin xz}{(z^2 + 1)^{3/2}} dz = \frac{x}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos xz}{(z^2 + 1)^{1/2}} dz = f'(x),$$

és  $f(x)$  a fentivel azonos függvény.

Míg a részecske irányára merőleges mozgás közben az átvitt energia mindig kisebb, mint a szabadnak tekintett elektron esetében számított energia, ez egyáltalán nem igaz a részecske pályájával párhuzamos mozgás esetében.



Az elektronra az ütközés alatt átvitt teljes energia:

$$Q = Q_1 + Q_2 = \frac{2e^2 E^2}{m V^2 p^2} P\left(\frac{np}{V}\right), \quad (2)$$

ahol  $P(x) = f^2(x) + g^2(x)$  egyenlő 1-gyel, ha  $x=0$ , és nagyon gyorsan csökken növekvő  $x$  értékekkel, ha  $x$  nagy;  $x=0$ -ra megjegyezzük, hogy  $P'(x)=0$ .

Tekintsünk most egy anyagon keresztül haladó részecskét. Tegyük fel, hogy az atomok száma térfogategységenként  $N$ , és minden atom  $r$   $n$  frekvenciájú elektront tartalmaz. Legyen továbbá  $a$  egy  $\lambda$ -hoz viszonyítva nagy, de  $V/n$ -hez képest kicsi konstans, (lásd 195. old.) akkor, mialatt a részecske  $dx$  távolságot megtesz, az elektronnak átadott teljes  $dT$  energia

$$dT = Nr \left[ \int_0^a Q_0 2\pi p dp + \int_a^\infty Q 2\pi p dp \right] dx;$$

(1) és (2) segítségével kapjuk:

$$dT = \frac{4\pi e^2 E^2 Nr}{m V^2} \left[ \int_0^a \frac{p dp}{p^2 + \lambda^2} + \int_a^\infty \frac{1}{p} P\left(\frac{np}{V}\right) dp \right] dx.$$

Elhanyagolva  $(\lambda/a)^2$ -t (lásd fentebb) kapjuk:

$$dT = \frac{4\pi e^2 E^2 Nr}{m V^2} \left[ \log\left(\frac{a}{\lambda}\right) + \int_{\frac{an}{V}}^\infty \frac{1}{z} P(z) dz \right] dx,$$

$$dT = \frac{4\pi e^2 E^2 Nr}{m V^2} \left[ \log\left(\frac{a}{\lambda}\right) - \log\left(\frac{an}{V}\right) \cdot P\left(\frac{an}{V}\right) - \int_{\frac{an}{V}}^\infty \log z \cdot P'(z) dz \right] dx.$$

Feltételünkkel egybehangzóan  $\left(\frac{an}{V}\right)$  nagyon kicsi) írhatjuk  $P\left(\frac{an}{V}\right) = 1$ .

Az  $\int$ -határául vehetjük 0- és  $\infty$ -t, ( $P'(0)=0$ )-t. A következő jelöléssel:

$$\int_0^\infty \log z P'(z) dz = -\log k$$

kapjuk:

$$dT = \frac{4\pi e^2 E^2 Nr}{m V^2} \log\left(\frac{V^3 k M m}{n e (M + m)}\right) dx.$$

Kiszámítottam  $k$  értékét  $f(x)$  fenti kifejezése segítségével és kaptam

$$k = 1,123.$$

Ha feltesszük, hogy az atom különböző frekvenciáknak megfelelő elektronokat tartalmaz, és ha az  $r$  elektron  $e$  frekvenciáit az ilyen atomokban  $n_1, n_2, \dots, n_r$ -rel jelöljük, kapjuk

$$dT = \frac{4\pi e^2 E^2 N}{mV^2} dx \sum_{s=1}^{s=r} \log \left( \frac{V^3 k M m}{n_s e E (M + m)} \right). \quad (3)$$

Mivel  $dT$  egyenlő a részecske kinetikus energiájának ( $\frac{1}{2} M V^2$ ) csökkenésével, kapjuk:

$$\frac{dV}{dx} = - \frac{4\pi e^2 E^2 N}{m M V^3} \sum_{s=1}^{s=r} \log \left( \frac{V^3 k M m}{n_s e E (M + m)} \right). \quad (4)$$

A (4) formula bevezetésénél csak a részecske és elektron közti kölcsönhatást vettük figyelembe, és nem a részecske és az atom centrális töltése közti kölcsönhatást. Darwin azonban kimutatta [9], hogy az utóbbi kölcsönhatás hatása elhanyagolhatóan kicsi az előbbihez képest. Ez a következtetés változatlanul érvényes a fent kidolgozott elméletben is.

A (4) formula kifejezi a mozgó elektromosan töltött részecske sebességcsökkenésének mértékét, mint a részecske sebességének, az elektronok számának és frekvenciájának a függvényét.

Ha  $V$  igen nagy, elhanyagolhatjuk változását a logaritmus tényezőben, és a részecske sebessége és az anyagban megtett útja közt a következő összefüggést kapjuk ( $x = 0$ -ra  $V_0$ -al jelöljük a sebességet)

$$V_0^4 - V_x^4 = ax, \quad (5)$$

ahol

$$a = \frac{16\pi e^2 E^2 N}{m M} \sum_{s=1}^{s=r} \log \left( \frac{V_0^3 k M m}{n_s e E (M + m)} \right).$$

Ennek a relációnak ugyanolyan alakja van, mint amelyet J. J. Thomson vezetett le és amelyről Whiddington kimutatta, hogy katódsugarakra közelítőleg érvényes (lásd 191. oldal). Még nagyobb sebességeknél (amelyek a leggyorsabb  $\beta$ -sugaraknak felelnek meg) az  $x$  és  $V$  közti összefüggés alakja megváltozik annak megfelelően, hogy a részecskék tömege igen gyorsan nő, ha sebességük nagyon közel van a fény sebességéhez (lásd később 206. oldal).

A részecskék kisebb sebességértékeinél a logaritmus tényező lényegesen befolyásolja a  $V$  és  $x$  közti összefüggést. Az effektus olyan értelmű, hogy az (5) egyenlet baloldalán  $V$  hatványkitevője csökken. Ez megegyezik az  $\alpha$ -részekkel végzett kísérletek eredményével.

Ha feltételezzük, hogy az elektronok száma az atomban arányos az atomsúllyal és ha figyelembe vesszük, hogy a növekvő atomsúlyú elemek atomjai növekvő frekvenciájú elektronokat tartalmaznak, akkor nyomban látjuk, hogy a (4) formula megadja az  $\alpha$ -sugarak különböző elemekben való abszorpciójának lényeges vonásait. Számot ad arról a tényről, hogy a négyzetcentiméterenként egyenlő súlyú anyag abszorpciója csökken az elemek atomsúlyának növekedésével [11]. Számot ad továbbá arról a tényről, hogy a különböző elemek relatív abszorpciója az  $\alpha$ -sugarak sebességével változik, a nehezebb elemek abszorpciója nagyobb a nagyobb sebességű sugarakra nézve [12].



Az elmélet és kísérlet pontosabb numerikus összehasonlítása kedvéért meg kell jegyezni, hogy a (4) formula levezetésében tettünk néhány feltevést az elektronok frekvenciájának és sebességének nagyságrendjéről, amelyet nem lehet kielégíteni az összes atomban levő elektron esetében a részecskék kérdéses sebességeinél. Ezek a feltevések a következők:

1. Az  $n$  frekvencia kicsi  $V/\lambda$ -hoz képest;
2. Az elektronok  $\tau$  sebessége a perturbálatlan pályájukon kicsi a részecske sebességéhez képest;
3. A kérdéses pályák lineáris méretei  $\varrho$  kicsik  $V/n$ -hez képest (l. 196. old.).

Nagyságrendeket tekintve  $\tau$  és  $\varrho$  között a  $\tau = n\varrho$  összefüggés van, ezért látjuk, hogy a 2. és 3. feltétel egyidejűleg teljesül. A számítások magukban foglalják még a következő feltevést:

4. Az elektronnak a részecskétől kifejtett erők által okozott elmozdulása kicsi a perturbálatlan pályájuk dimenzióihoz viszonyítva olyan ütközések esetén, amelyeknél az atom részéről kifejtett erőket is számításba vettük. Más szóval ilyen ütközéseknél semmi más, mint ionizáció, nem fordul elő. Azonban, amint a részecskék és az elektronok közti erők azonos távolságban ugyanolyan nagyságrendűek, mint az elektronnra a centrális töltés és a többi elektron miatt ható erők, akkor beláthatjuk, hogy a 4. feltétel is teljesül, ha a 3. teljesül.

Nagyon nehéznek látszik pontosan számításba venni az eredményben fellépő változásokat, amelyek a fenti feltételek ki nem elégítéséből származnak; de könnyű belátni, hogy ha az  $\frac{n\lambda}{V}$  és  $\frac{n\varrho}{V}$  arányok kicsi mennyiségek, akkor a korrekciók az eredményben ezeknek az arányoknak a négyzetgyökével arányosak [12].

### *Összehasonlítás a kísérletekkel*

#### *I. $\alpha$ -sugarak*

Először az  $\alpha$ -sugarak abszorpcióját vizsgáljuk, mivel ezeknek a sugaraknak a viselkedése a kis szóródás miatt sokkal pontosabban ismeretes, mint a  $\beta$ - vagy katód-sugarak viselkedése.

Abszolút mérést az  $\alpha$ -sugarak sebességének változására az anyagban megtett út függvényében Geiger végzett újabban levegő esetében [13]. Azt találta, hogy a következő összefüggés:

$$V^3 = KR \quad (6)$$

(ahol  $V$  az  $\alpha$ -sugarak sebessége,  $R$  a megfelelő hatótávolság a levegőben), nagy pontossággal igaz a sugarak útjának igen nagy részén.  $K$  meghatározásához tudjuk, hogy rádium  $C$   $\alpha$ -sugarainak hatótávolsága levegőben 7,06 cm (76 Hgcm és 20 C°) [14], kezdősebessége  $1,98 \cdot 10^9$  cm/sec [15]; ezekből  $K = 1,10 \cdot 10^{27}$ .



Taylor végzett alapos méréseket különböző elemek relatív abszorpció-koefficienseire vonatkozólag, különböző hatótávolságú  $\alpha$ -sugarak esetén [16]. Az abszorbeáló rétegekbe belépő  $\alpha$ -sugarak levegőben vett hatótávolságai ezekben a kísérletekben kb. 5 cm-től 2 cm-ig változtak. Az I. táblázatban levő adatok a levegőhöz viszonyított abszorpcióra Taylor II. és III. táblázataiból (idézett dolgozat 608—610 oldal) interpoláció útján származnak. Az idézett hatótávolság az abszorpciós rétegbe belépő és kilépő  $\alpha$ -sugarak hatótávolságának középértéke. Az abszorpcióértékek különböző méréssorozatokból számított középértékek, amelyeknél ugyanazt az abszorbeáló anyagot használták.

I. táblázat

Hatótávolság levegőben	2,24	4,87
Hidrogén . . . . .	0,267	0,224
Levegő . . . . .	1,00	1,00
Alumínium . . . . .	$1,69 \cdot 10^3$	$1,75 \cdot 10^3$
Ón . . . . .	$2,33 \cdot 10^3$	$2,56 \cdot 10^3$
Arany . . . . .	$4,71 \cdot 10^3$	$5,57 \cdot 10^3$
Ólom . . . . .	$3,06 \cdot 10^3$	$3,53 \cdot 10^3$

A 2,24 és 4,87 cm-es hatótávolságok  $1,35 \cdot 10^9$  és  $1,75 \cdot 10^9$  cm/sec sebességeknek felelnek meg az (5) képlet szerint. Ugyanezen képlet szerint azt kapjuk továbbá, hogy ezeknél a sebességeknél  $dV/dx$  levegőben  $-2,01 \cdot 10^8$ , illetve  $-1,20 \cdot 10^{-8}$ . Ebből kiindulva az I. táblázat segítségével a II. táblázatban levő értékeket kapjuk  $-\frac{dV}{dx}$ -re.

II. táblázat

Sebesség . . . . .	$1,35 \cdot 10^9$	$1,75 \cdot 10^9$
Hidrogén . . . . .	$5,4 \cdot 10^7$	$2,7 \cdot 10^7$
Levegő . . . . .	$2,01 \cdot 10^8$	$1,20 \cdot 10^8$
Alumínium . . . . .	$3,4 \cdot 10^{11}$	$2,1 \cdot 10^{11}$
Ón . . . . .	$4,7 \cdot 10^{11}$	$3,1 \cdot 10^{10}$
Arany . . . . .	$9,5 \cdot 10^{11}$	$6,7 \cdot 10^{11}$
Ólom . . . . .	$6,1 \cdot 10^{11}$	$4,2 \cdot 10^{11}$

### Hidrogén

Hogy a fenti értékeket az elmélettel összehasonlítsuk, kezdjük a hidrogénnel, amelyre a 200. oldalon említett feltevések a legnagyobb mértékben teljesülnek. A (4) képletbe behelyettesítve a következő értékeket:

$$e = 4,65 \cdot 10^{-10}, \quad E = 2e, \quad e/m = 5,31 \cdot 10^{17}, \quad E/M = 1,46 \cdot 10^{14}$$



és  $N = 2,59 \cdot 10^{10}$ -t (76 Hgcm és 20 C°-on) kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} V = 1,35 \cdot 10^9 \text{ esetén } \frac{dV}{dx} &= 4,42 \cdot 10^6 \sum_{s=1}^{s=r} (\log(n_s \cdot 10^{-19}) + 0,59) \\ \text{és } V = 1,75 \cdot 10^9 \text{ esetén } \frac{dV}{dx} &= 2,03 \cdot 10^6 \sum_{s=1}^{s=r} (\log(n_s \cdot 10^{-19}) - 0,18) \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Törési és diszperziós kísérletekből és ezeknek a Drude-elmélet szerint elvégzett diszkussziójából C. és M. Cuthbertson azt találta, hogy a hidrogén-molekula normál állapotában két elektront tartalmaz  $n = 2,21 \cdot 10^{16}$  frekvenciával [17]\*.

$r = 2$  és  $n_1 = n^2 = 2,21 \cdot 10^{16}$ -t helyettesítve a fenti formulába, kapjuk:

$$V = 1,35 \cdot 10^9 \text{ esetén } \frac{dV}{dx} = -4,9 \cdot 10^7$$

$$V = 1,75 \cdot 10^9 \text{ esetén } \frac{dV}{dx} = -2,6 \cdot 10^7.$$

Ezek az értékek jó egyezésben vannak a  $\frac{dV}{dx}$ -re a II. táblázatban foglalt adatokkal:

$$\frac{dV}{dx} = -5,4 \cdot 10^{-7} \quad \text{és} \quad \frac{dV}{dx} = -2,7 \cdot 10^7.$$

A számított és megfigyelt értékek közti kis eltérés nem nagyobb annál, ami várható a szereplő konstansok lehetséges mérési hibája miatt, amelyek csak 10%-os pontossággal ismeretesek. Most megvizsgáljuk, milyen mértékben teljesülnek a 200. oldalon tett feltevések a kérdéses esetben.  $V = 1,75 \cdot 10^9$  esetén kapjuk:

$$\lambda = \frac{eE(M+m)}{V^2 M m} = 1,6 \cdot 10^{-10} \quad \text{és} \quad \frac{V}{n} = 0,8 \cdot 10^{-7}.$$

Látjuk, hogy az első feltétel bőven teljesül. Továbbá, a  $\varrho$  mennyiségre feltételezett maximális érték a 200. oldalon kb.  $10^{-8}$ , vagyis egy hidrogén molekula sugara; így kapjuk a  $\frac{\varrho n}{V}$ -re feltételezett maximális értékre azt, hogy kb. 0,1.

Mivel a  $\frac{\varrho n}{V}$  véges értéke miatt felvett korrekciók ezen mennyiség négyzetével

\* C. és M. Cuthbertson. Proc. Roy. Soc. A. 83, 166, (1909) lásd még Drude, Ann. d. Phys. 14, 714, (1904). Azonban az egyezés még Drude elméletével nem egészen kielégítő, mivel a kiadódó elektronszám valamivel kisebb 2-nél. Ennek a ténynek valószínű magyarázata úgy látszik az, hogy az elektronok frekvenciája nem azonos bármely irányban való elmozdulásnál. Ez olyan körülmény, amelyet nem várunk egy legfellebb egy szimmetria tengellyel bíró rendszernél, amely a kétatomos molekulák tengelye. Ezt a kérdést egy későbbi dolgozatban megvizsgáljuk; pillanatnyilag a fenti  $n$  értékeket használhatjuk. Ugyanis ebben az értékben szükséges korrekció hatása, amely a jelzett dolgozathoz következik, nem nagyobb, mint a számításokba belépő más kísérleti konstansokban levő bizonytalanság.



arányosak, amint a 200. oldalon említettük, azért a vizsgált esetben ezt nagyon kicsinek kell várnunk.

Itt jegyezhetjük meg, hogy a fenti  $\frac{V}{n}$  érték mutatja, hogy a 200. oldalon említett effektív küszöbérték az elektronoknak a részecskék sebességére való hatásában hidrogén esetében a tárgyalt sebességű részecskékre, kb. 8-szorosa a molekula sugarának. A fény sebességéhez közeli sebességű  $\beta$ -sugarakra a kérdéses küszöb több mint 100-szorosa volna a molekulák sugarának.

Látjuk, hogy az  $\alpha$ -sugarak hidrogénben való abszorpciója kielégítően megindokolható, ha ugyanannyi és ugyanolyan frekvenciájú elektront tételezünk fel molekulánként, mint a törés és diszperzió magyarázatára. Itt említhetjük meg, hogy ha feltételeznénk, hogy a hidrogén molekula kettőnél több elektront tartalmaz, akkor az elmélet szerint a további elektronok frekvenciájának extrém magasnak kellene lennie. Ugyanis a nekik tulajdonítandó abszorpció a fenti számolás szerint nem lehet több, mint a vizsgált két elektronnak megfelelő abszorpció 10 százaléka. Feltéve, hogy a molekula két további elektront tartalmaz, azt kapjuk, hogy  $n$  ezekre az elektronokra legalább  $10^{18}$  nagyságrendű. Ezt az  $n$  értéket nehéz összeegyeztetni a karakterisztikus Röntgen sugarakkal végzett kísérletekkel (v. ö. később 205. old.). Ha elfogadjuk Rutherford elgondolását az atom szerkezetére vonatkozólag, akkor azt látjuk, hogy az  $\alpha$ -sugarak abszorpciójára végzett mérések nagyon erősen azt mutatják, hogy egy hidrogén atom csak egy elektront tartalmaz a pozitívan töltött magon kívül.

### Hélium

Hélium esetében nincs mérés az abszorpció koefficiensre különböző sebességeknél; az egyetlen kísérlet ezzel a gázzal Adams mérése [18], amelyben meghatározta a polonium  $\alpha$ -sugarának hatótávolságát héliumban. Adams azt találja, hogy az abszorpció valamivel nagyobb, mint hidrogénben; az arány 1,15.

Cuthbertson kísérleteivel [19] és Drude elméletével összhangban héliumban a diszperzió atomonként két elektron feltételezésével magyarázható meg (a számított érték 2,3), amelyeknek frekvenciája  $n = 3,72 \cdot 10^{16}$ .

Ezeket az értékeket vezetve be  $r$  és  $n$ -re a (4) képletbe  $\frac{dV}{dx}$ -re héliumban valamivel kisebb értékeket kapunk, mint fentebb a hidrogén esetében. Az arány  $V = 1,75 \cdot 10^9$ -nél 0,92 és  $V = 1,35 \cdot 10^9$ -nél 0,90.

Ha ez az eltérés valóban megvan (Adams megállapítja [idézett dolgozat 111 o.], hogy a használt gáz tisztasága nem volt biztosítva eléggé; a héliumnak egy kis szennyezése nehezebb gázokkal megmagyarázhatja a kérdéses eltérést), akkor ez azt sejteti, hogy az elhanyagolt korrekció a hélium esetében sem lehet jelentős. Mivel azonban a  $\frac{\partial n}{V}$  mennyiség a feltétel szerint



kb. kétszer nagyobb héliumnál, mint hidrogénnél, látjuk másfelől, hogy a hélium esetében a kb. 30%-os korrekció nem jelent többet, mint a 10% hidrogén esetében. Az oxigénre és alumíniumra vonatkozó következő eredmények szerint azonban a vizsgált korrekciók még sokkal kisebbek.

Az  $r = 2$  érték a hélium elektronjai számára, amelyet a diszperziós és  $\alpha$ -sugár abszorpciós kísérletek jeleznek, olyan érték, amelyre az  $\alpha$ -sugarak viselkedéséből szükségszerűen kell következtetnünk, ha elfogadjuk Rutherford atom-elméletét, amely szerint a héliumatomok, amelyek  $\alpha$ -részecskékből állnak csak két elektront tartalmazhatnak a centrális magon kívül.

### Oxigén

Az abszorpció arányára oxigénben és levegőben Adams (idézett dolgozat 113 old.) 1,03-at kapott, tehát a II. táblázat szerint oxigénre a következőket kapjuk

$$V = 1,35 \cdot 10^9 \text{ cm/sec esetén } \frac{dV}{dx} = -2,07 \cdot 10^8$$

és

$$V = 1,75 \cdot 10^9 \text{ cm/sec esetén } \frac{dV}{dx} = -1,24 \cdot 10^8.$$

A (7) formulával való összehasonlításból pedig:

$$\sum_{s=1}^{s=r} (\log(n_s \cdot 10^{-19}) + 0,59) = -47,$$

$$\sum_{s=1}^{s=r} (\log(n_s \cdot 10^{-19}) - 0,18) = -61.$$

Ebből kapjuk először kivonással

$$r \cdot 0,77 = 14, \text{ vagyis } r = 18.$$

Rutherford atomelmélete szerint 16 elektront várhatunk egy oxigén molekulában. Ezen érték és a fenti  $r$  érték közt az egyezés nagyon kielégítő.

A fentiekből kapjuk továbbá:

$$\sum_{s=1}^{s=r} \log(n_s \cdot 10^{-19}) = -58.$$

Diszperziós kísérletekből [20] ismeretes, hogy egy oxigén molekula 4 olyan elektront tartalmaz, melyeknek frekvenciája  $2,25 \cdot 10^{16}$ ; ezért

$$\sum_{s=0}^{s=r} \log(n_s \cdot 10^{-19}) = -58 + 4 \cdot 6,1 = -34.$$

Ha egyelőre feltesszük, hogy az oxigén molekulában feltételezett többi 12 elektronnak egyenlő  $n'$  frekvenciája van, akkor

$$\log(n' \cdot 10^{-19}) = -2,8, \text{ és } n' = 0,6 \cdot 10^{18}.$$



Nagyon keveset tudunk oxigénben a magasabb frekvenciákról, de bizonyos becsléseket tehetünk a karakterisztikus Röntgen-sugarakkal végzett kísérletekből. Whiddington [21] azt találta, hogy a karakterisztikus Röntgen sugárzás gerjesztésére egy  $A$  atomsúlyú elemnél az elektron szükséges sebessége  $A \cdot 10^8$  cm/sec. Az ilyen sebességű elektron energiája  $\frac{m}{2} A^2 \cdot 10^{16}$ . Planck sugárzási elmélete szerint egy atomi oszcillátor által kisugárzott legkisebb energiamenyiség egyenlő  $v \cdot k$ -val, ahol  $v$  a rezgések száma másodpercenként és  $k = 6,55 \cdot 10^{-27}$ . Azt kell várnunk, hogy ez a mennyiség egyenlő, vagy legalább is azonos nagyságrendű, mint a sugárzást éppen gerjeszteni tudó elektron energiája. Egyenlővé téve ezeket, kapjuk, hogy  $vk = \frac{m}{2} A^2 \cdot 10^{16}$ , ebből  $v = A^2 \cdot 6,7 \cdot 10^{14}$ . Az oxigén karakterisztikus Röntgen-sugárzására nem történt még kísérlet, de ha feltesszük, hogy Whiddington törvénye erre az elemre is érvényes és  $A = 16$ -ot helyettesítünk  $v$  kifejezésébe, akkor  $v = 1,7 \cdot 10^{17}$ -t kapunk és a frekvencia  $n = 2\pi v = 1,1 \cdot 10^{18}$ . Az egyezés ezen érték és a fenti  $n'$  érték között nagyságrendben megvan. Ez figyelemre méltó, mert  $n'$  értékét az  $\alpha$ -sugarak abszorpciójából számoltuk.

A (4) képletben használandó korrekció nagyságrendjét megbecsülhetjük az oxigén esetében. Ehhez diszkutálni kell az atombeli elektron-pályák dimenziói és a frekvenciák közti összefüggést és ezért el kell halasztani a [17]-ben jelzett dolgozat megjelenéséig.

Alumíniumra, ónra, aranyra és ólomra az oxigénhez hasonló módon, a II. táblázat értékeit összehasonlítva a (4) képlettel, kapjuk a következő  $r$  és  $\sum \log (n_s \cdot 10^{-19})$  értékeket (III. táblázat).

III. táblázat

Anyag	$r$	$-\sum_{s=1}^{s=r} (\log n_s \cdot 10^{-19})$	Atomsúly
Alumínium . . . . .	14	41	27
Ón . . . . .	38	94	119
Arany . . . . .	61	126	197
Ólom . . . . .	65	132	207

Rutherford elmélete szerint  $r$ -re az atomsúly felével egyenlő értékeket várunk; látjuk, hogy ez alumínium esetében igaz, de a nagyobb atomsúlyú elemeknél az  $r$  értékek lényegesen alacsonyabbak. A  $\sum \log n_s$ -re talált értékek a várt nagyságrendben vannak, ha az atomok olyan elektronokat tartalmaznak, amelyek frekvenciája különböző és ezek nagyságrendje az átlátszó közegek diszperziójánál észlelt frekvenciáktól a karakterisztikus Röntgen-sugarak frekvenciáig terjed. Azonban meg kell jegyeznünk, hogy a (4) formulában



bevezetendő korrekciók várhatóan növekedni fognak a vizsgált anyag atom-súlyának növekedésével. Várható továbbá, hogy nagyobb atomsúlyú elemeknél főleg az  $r$ -re számolt értékek bizonytalanok, mivel ezeket az értékeket úgy határozzuk meg, hogy a különböző sebességű  $\alpha$ -sugarak abszorpciójában vizsgáljuk a különbségeket. Ezeknél a sebességeknél az elhanyagolt korrekciók lényegesebbek lehetnek.

## II. Katód-sugarak és $\beta$ -sugarak

Whiddington végezte a legkiterjedtebb méréseket az anyagon keresztül haladó katódsugarak sebességsökkenésére [22]. A szerző  $5 \cdot 10^9$  és  $9 \cdot 10^9$  cm/sec közti sebességgel rendelkező katódsugarakat használva azt találta, hogy a sugarak sebességének változása és az anyagban megtett út között az (5) egyenletben megadott összefüggés van. A fellépő konstans meghatározása:

Alumíniumra  $a = 7,32 \cdot 10^{42}$ ; aranyra  $a = 2,54 \cdot 10^{43}$ ; és levegőre 760 Hgmm nyomáson és  $15^\circ\text{C}$ -on  $a = 2,0 \cdot 10^{40}$ .

$a$ -nak a 199. oldalon levő kifejezéséből  $V = 7 \cdot 10^9$ -et helyettesítve,  $r$ -re és  $\sum \log n_s$ -re bevezetve az  $\alpha$ -sugarak abszorpciójánál talált értékeket kapjuk, hogy

alumíniumnál  $a = 1,9 \cdot 10^{43}$ ; aranyánál  $a = 7,3 \cdot 10^{43}$ ; és levegőnél  $a = 1,1 \cdot 10^{40}$ .

Látjuk, hogy a megfigyelt és számított értékek nagyságrendben egyeznek, de a különbségek nagyon jelentősek. Alumíniumra és aranyra a számított értékek kb. háromszor nagyobbak mint a megfigyelési értékek, és a levegőre számított érték kb. fele a megfigyeltnek. Nehéznek látszik számot adni erről az eltérésről, ha csak nem lehet valamilyen úton a rendkívül nehéz kísérleti körülményeknek tulajdonítani. Meg kell jegyezni, hogy a sebességsökkenés mértékének alumíniumra és levegőre mért aránya Whiddington kísérleteiben ötször kisebbnek adódott, mint  $\alpha$ -sugarakkal való kísérleteknél. Ez olyan körülmény, amelyet nehezen lehet összeegyeztetni olyan adatokkal, amelyeket a különböző sebességű  $\alpha$ -sugarakkal való kísérletek adnak, vagy amelyeket az  $\alpha$ - és  $\beta$ -sugarakkal végzett kísérletek eredményeinek összehasonlításából kapunk, hogy t. i. a különböző anyagokban való sebességsökkenés az atomok számára átszámítva nagyobb a nagyobb atomsúlyú elemeknél, és hogy a sebességsökkenés mértékei közti arány növekszik a sugarak sebességének növekedésével.

A  $\beta$ -sugarak sebességsökkenését nagyon kemény  $\beta$ -sugarakra W. Wilson mérte [23], és újabban lassúbb sugarakra O. v. Baeyer [24]. Az utóbbi szerző alumínium abszorbenst és  $1 \cdot 10^{10}$  és  $2 \cdot 10^{10}$  cm/sec közti sebesség intervallumba eső elektronokat használva azt találta, hogy a sebesség változása közelítőleg kielégít egy olyan összefüggést, amely Whiddington összefüggésével azonos alakú. Nála  $1,5 \cdot 10^{10}$  cm/sec sebességre az  $a$  konstans  $1,1 \cdot 10^{42}$ -nek adódott.

$a$  kifejezéséből (199. old.) a vizsgált sebességek esetén  $r$ - és  $\sum \log n_s$ -re az  $\alpha$ -sugaraknál talált értékeket helyettesítve és  $M = 1,54$  m-et, vagyis a



fénysebesség felével megegyező sebességgel mozgó elektron tömegét véve (a részecskék tömegének változása ilyen sebességnél már lényeges befolyást gyakorol az  $a$  konstansra, de a tömegnek a sebességgel való változása mégis kicsi ahhoz, hogy a  $V$ -t és  $x$ -et összekapcsoló relációt megváltoztassa) kapjuk, hogy

$$a = 1,7 \cdot 10^{12}.$$

Látjuk, hogy ezeknél a gyorsabb sugaraknál jobb az egyezés, mint amit fentebb a katód-sugaraknál találtunk.

O. v. Baeyer végzett néhány mérést a  $\beta$ -sugarak sebességcsökkenésére ónban, rézben és platinában. Ezeknek a kísérleteknek az volt az eredménye, hogy azonos sebességek esetében a csökkenés mértéke közelítőleg az abszorbeáló anyag sűrűségének négyzetével arányos. A nagyobb atomsúlyú elemek látszólag valamivel kevesebbet abszorbeáltak ugyanazon súly/cm<sup>2</sup> esetén. Ezek az eredmények megegyeznek azzal, amit az elmélet alapján várhatunk.

Wilson azt találta, a nagyon kemény  $\beta$ -sugarak alumíniumban való sebességcsökkenésére végzett kísérleteinek eredménye jobban egyezik egy  $E_s - E_x = kx$  alakú egyenlettel (ahol  $E$  a részecske energiája), mint a (4) egyenlettel. Azonban éppen ezt lehet várni az elmélet alapján. Ugyanis fénysebességhez közeli sebesség esetén a  $\beta$ -részecske igen rohamosan nő és ezért ilyen sebességeknél a  $V^2$ -ben fellépő változás igen kicsi a részecske energiájának a változásához képest. A (3) egyenletet figyelembevéve tehát azt kapjuk, hogy a részecske energiája és az anyag vastagsága közti összefüggés a szóbanforgó sebességekre olyan, mint amelyet Wilson talált. Wilson II. táblázatából (idézett dolgozat, 147. old.) kapjuk, hogy

$$V = 2,8 \cdot 10^{10} \text{ cm/sec esetén } \frac{dE_x}{dx} = -8,0 \cdot 10^{-6}.$$

A (3) egyenletből erre a sebességre  $r$  és  $\Sigma \log n_s$  fenti értékeit használva kapjuk:

$$\frac{dE_x}{dx} = -8,8 \cdot 10^{-6}.$$

Ez az érték közelítőleg egyezik Wilson értékével. Az elmélet és a kísérlet közti egyezés a gyors  $\beta$ -részecskék esetén jobb, mint a lassú  $\beta$ -részecskék és katódsugarak esetén. Ennek valószínű oka az egyszerűbb kísérleti körülmények a gyors  $\beta$ -részek esetén, mert a sebesség eredeti homogenitása sokkal nagyobb mértékben megmarad anyagon való áthaladás közben ezeknél a sugaraknál, mint a lassúbb sugaraknál.

### Összefoglalás

Ebben a dolgozatban az anyagon áthaladó elektromosan töltött részecskék sebességcsökkenésének elméletét adjuk olyan formában, hogy a sebességcsökkenés mértéke az abszorbeáló anyag atomjaiban levő elektronok rezgéseinek frekvenciájától függ.



Kimutattuk, hogy az  $\alpha$ -sugarak abszorpciója a legkönnyebb elemek esetén kiszámítható az atomok elektronjai számának és frekvenciájának ismeretében. Ezeket az adatokat a diszperzió elméletéből vesszük. Az eredmények jól egyeznek a kísérleti eredményekkel. Nagyobb atomsúlyú elemeknél kimutattuk, hogy az elektronok ama száma és frekvenciája, amelyet fel kell tételeznünk az elmélet szerint, hogy az  $\alpha$ -sugarak abszorpcióját megmagyarázzuk, a várt nagyságrendben van.

Megmutattuk továbbá, hogy az elmélet számot ad a sugarak sebessége és az anyagban megtett út közti összefüggés alakjáról, amelyet katód- és  $\beta$ -sugarak esetében találtak. A kérdéses összefüggésben szereplő állandó egyezése nagyon jó a leggyorsabb  $\beta$ -sugarak esetében, de nem olyan jó lassú  $\beta$ -sugarak és katódsugarak esetében. Ez a tény az utóbbi sugarak vizsgálatánál fellépő rendkívül nehéz kísérleti körülményeknek tulajdonítható.

Elfogadva Rutherford elméletét az atomok szerkezetéről, úgy látszik, hogy az  $\alpha$ -sugarak abszorpciójából nagy biztonsággal lehet következtetni, hogy a hidrogén atom csak 1 elektront és a hélium 2 elektront tartalmaz a pozitív töltésű magon kívül. Az utóbbi szükségszerűen következik Rutherford elméletéből.

Ezek a kérdések és néhány további ismeret az atomok szerkezetéről, melyeket az  $\alpha$ -sugarakkal való abszorpciós kísérletekből kaphatunk, egy későbbi részletesebb dolgozat tárgyát képezik.

Ki kívánom fejezni őszinte köszönetemet Rutherford professzornak munkám iránti szíves érdeklődéséért és a nekem adott sok segítségért.

Fordította: *Keszthelyi Lajos*

#### IRODALOM

- <sup>1</sup> J. J. Thomson, „Conduction of Electricity through Gases“, 370—382. o.
- <sup>2</sup> R. Whiddington, Proc. Roy. Soc. A. 86. 360, (1912)
- <sup>3</sup> E. Rutherford, Phil. Mag. 21, 669, (1911)
- <sup>4</sup> C. G. Darwin, Phil. Mag. 23, 907, (1912)
- <sup>5</sup> Hasonló feltételeket használt J. J. Thomson is egy új dolgozatában a mozgó elektromosan töltött részek ionizációjáról. Phil. Mag. 23, 449 (1912)
- <sup>6</sup> v. ö. J. J. Thomson Phil. Mag. 23, 454, (1912)
- <sup>7</sup> v. ö. J. J. Thomson, „Conduction of Electricity through Gases“ 376. o. és Phil. Mag. 23, 449 (1912); C. G. Darwin, idézett dolgozat 903. o.
- <sup>8</sup> Lásd Lord Rayleigh „Theory of Sound“ 75. o. A következő analízis miatt v. ö. J. H. Jeans „Kinetic Theory of Gases“ 198. o.
- <sup>9</sup> Darwin, idézett dolgozat 905. o.
- <sup>10</sup> W. H. Bragg and R. Kleeman, Phil. Mag. 10. 318, (1905)
- <sup>11</sup> T. S. Taylor, Phil. Mag. 18, 604, (1909)
- <sup>12</sup> v. ö. Darwin, idézett dolgozat, 902. o.
- <sup>13</sup> H. Geiger, Proc. Roy. Soc. A. 83, 505, (1910)
- <sup>14</sup> Bragg és Kleeman idézett dolgozat, 318. o.

- <sup>15</sup> *E. Rutherford*, Phil. Mag. 12, 358, (1906). (A fenti érték  $V$ -re Rutherford értéke  $V.M/E$ -re,  $4,87 \cdot 10^3$ -nal, vagyis a hélium  $E/M$  értékével szorozva.)
- <sup>16</sup> *T. S. Taylor*, Phil. Mag. 18, 604, (1909)
- <sup>17</sup> *C. és M. Cuthbertson*. Proc. Roy. Soc. A. 83, 166, (1909) lásd még *Drude*, Ann. d. Phys. 14, 714, (1904).
- <sup>18</sup> *E. P. Adams*, Physical Review, 24, 113, (1907)
- <sup>19</sup> *C. & M. Cuthbertson*, Proc. Roy. Soc. A. 84, 13, (1910)
- <sup>20</sup> *C. & M. Cuthbertson*, idézett dolgozat, 166. o.
- <sup>21</sup> *R. Whiddington*, Proc. Roy. Soc. A. 85, 328, (1911)
- <sup>22</sup> *R. Whiddington*, Proc. Roy. Soc. A. 86, 360, (1912)
- <sup>23</sup> *W. Wilson*, Proc. Roy. Soc. 84, 141, (1910)
- <sup>24</sup> *O. v. Baeyer*, Physikalisches Zeitschrift, 13, 485, (1912)



Technikai szerkesztő: Turchányi György

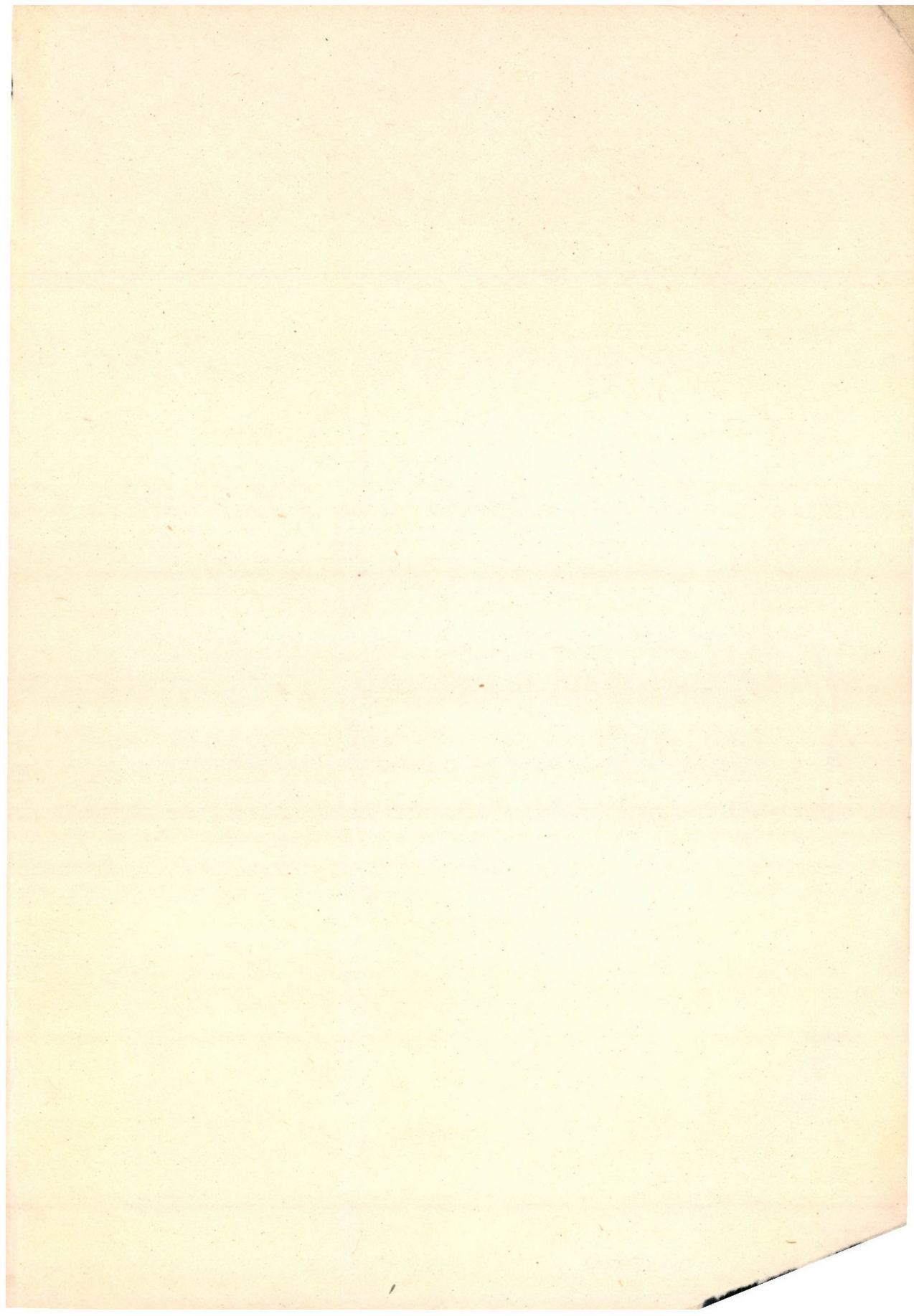
A kiadásért felelős: Mestyán János.

Műszaki felelős: Tóth Ferenc

A kézirat beérkezett: 1953. X. 6. — Példányszám: 1000 — Terjedelem: 18.5 (A/5) iv, 70 ábra

Csongrádmegyei Nyomdaipari Vállalat, Szeged, 53-4603

Felelős vezető: Vincze György





## TARTALOMJEGYZÉK

	Oldal
Beköszöntő . . . . .	1
<i>Novobátzky Károly</i> : Az energia mechanikai mozgásegyenletei . . . . .	5
<i>Faragó Péter, Gécs Mária és Mertz János</i> : Magnyomatékok mérése mágneses rezonancia-abszorpcióval . . . . .	9
<i>Horváth János</i> : Megjegyzések a polarizációs energia numerikus kiszámításához . . . . .	19
<i>Jordan Károly</i> : Van der Waals állapotegyenlete . . . . .	27
<i>Ujhelyi Sándor</i> : Eljárás naftalin egykristályok előállítására . . . . .	33
<i>Tarján Imre</i> : Színcentrumok alkalihalogenid kristályokban . . . . .	39
<i>Szamosi Géza</i> : Az atommag héjszerkezete . . . . .	55
<i>Náray Zsolt</i> : A HF-molekula néhány állandójának hullámmechanikai meghatározása . . . . .	85
<i>Valkó Iván P. és Gergely György</i> : Új módszer relaxációs jelenségek vizsgálatára . . . . .	93
<i>Jánossy Lajos</i> : Hullámcsomag áthaladása potenciálfalon . . . . .	109
<i>Jánossy Lajos</i> : Tanulmányok a kaszkád-elméletről . . . . .	113
<i>Gáspár Rezső és Kónya Albert</i> : A HJ-molekula kötésének elméletéről . . . . .	133
<i>Selényi Pál</i> : Szelén fényelemek érzékenyítése az infravörösre, higanygőzzel . . . . .	145
<i>Marx György</i> : Az elektromágneses tér mozgó anizotróp közegekben . . . . .	155

### A FOLYÓIRODALOMBÓL

<i>Louis de Broglie</i> : Megmarad-e a kvantumfizika indeterminista jellege? . . . . .	173
--	-----

### A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>N. Bohr</i> : Anyagon áthaladó elektromosan töltött részecskék sebességcsökkenésének elmélete. (A szerkesztő előszavával.) . . . . .	191
---	-----